```
data_lach32a

_publ_section_comment
;
The structure has additional symmetry, however it was solved in a
lower symmetry space group so that differences
in the 'R' group could be determined. The last carbon in one of the
allyl (C3H5) groups could not be located, this
is likely to be due to disorder of this atom, as this atom was not
found the hydrogen atoms were not put on to this
group and therefore the number of atoms present in the cif does not
match those reported to be present.
The positions of some atoms could not be resolved absolutely, causing
some intra and intermolecular contacts
to be short.
A H+ ion must be present in the structure to balance the charge, this
is most likely coordinating between the P=O
groups at the top of the anion, however it can not be seen due to the
quality of the data.
Squeeze was carried out on the structure, to make allowance for
disordered solvent molecules.
;

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NEt4)3H[SiW10O36(C3H5PO)
(HOOCCH2CH2PO)]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C54 H123 N5 O81 P4 Si2 W20'
_chemical_formula_weight          5995.63

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.0817   0.0704
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Triclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'P1'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'

_cell_length_a                    24.735(5)
```

```
_cell_length_b                    10.8297(19)
_cell_length_c                    14.707(3)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  107.419(3)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      3758.9(12)
_cell_formula_units_Z             1
_cell_measurement_temperature     293(2)
_cell_measurement_reflns_used     ?
_cell_measurement_theta_min       ?
_cell_measurement_theta_max       ?

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           ?
_exptl_crystal_size_mid           ?
_exptl_crystal_size_min           ?
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.649
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              2698
_exptl_absorpt_coefficient_mu     15.368
_exptl_absorpt_correction_type    Multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'Sadabs'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       293(2)
_diffrn_radiation_wavelength      0.67030
_diffrn_radiation_type            'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source          'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Station 9.8'
_diffrn_measurement_method        'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             15983
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0504
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.1217
_diffrn_reflns_limit_h_min        -33
_diffrn_reflns_limit_h_max        33
_diffrn_reflns_limit_k_min        -14
_diffrn_reflns_limit_k_max        14
_diffrn_reflns_limit_l_min        -19
_diffrn_reflns_limit_l_max        19
_diffrn_reflns_theta_min          3.77
_diffrn_reflns_theta_max          33.01
_reflns_number_total              14663
_reflns_number_gt                 12089
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics     'Ortep-3 for Windows (Farrugia,
1997)'
```

```
_computing_publication_material   'WinGX (Farrugia, 1999)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0381P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    0.074(18)
_refine_ls_number_reflns          14663
_refine_ls_number_parameters      752
_refine_ls_number_restraints      340
_refine_ls_R_factor_all           0.0696
_refine_ls_R_factor_gt            0.0581
_refine_ls_wR_factor_ref          0.1481
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1416
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    0.972
_refine_ls_restrained_S_all       0.967
_refine_ls_shift/su_max           0.055
_refine_ls_shift/su_mean          0.011

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.105(3) 0.442(7) 0.258(4) 0.08(2) Uiso 1 1 d DU . .
C2 C 0.129(4) 0.390(8) 0.364(4) 0.10(3) Uiso 1 1 d DU . .
C4 C 0.083(5) 0.459(8) -0.263(5) 0.12(3) Uiso 1 1 d DU . .
H4A H 0.0498 0.5084 -0.2650 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.1150 0.5137 -0.2532 0.141 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.073(4) 0.390(9) -0.360(5) 0.12(3) Uiso 1 1 d DU . .
```

H5A H 0.1099 0.3926 -0.3683 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
H5B H 0.0678 0.3057 -0.3422 0.140 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.035(2) 0.396(5) -0.461(6) 0.17(3) Uiso 1 1 d DU . .
C7 C 0.6190(15) 0.938(3) 0.275(2) 0.012(6) Uiso 1 1 d DU . .
H7A H 0.6545 0.9822 0.2881 0.014 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.5889 0.9988 0.2631 0.014 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.6192(15) 0.863(4) 0.365(2) 0.023(8) Uiso 1 1 d DU . .
H8A H 0.5909 0.8954 0.3925 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.6102 0.7769 0.3488 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C 0.6774(19) 0.872(5) 0.437(3) 0.061(12) Uiso 1 1 d DU . .
C10 C 0.5928(17) 0.954(4) -0.273(2) 0.024(8) Uiso 1 1 d DU . .
H10A H 0.5596 1.0059 -0.2833 0.029 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H 0.6260 1.0064 -0.2535 0.029 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.5909(17) 0.888(4) -0.369(3) 0.036(9) Uiso 1 1 d DU . .
H11 H 0.6222 0.8602 -0.3861 0.044 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.532(2) 0.877(5) -0.427(4) 0.069(15) Uiso 1 1 d DU . .
H12A H 0.5030 0.9073 -0.4043 0.083 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.5227 0.8401 -0.4868 0.083 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.0622(18) 0.957(4) 0.450(3) 0.043(9) Uiso 1 1 d DU . .
H13A H 0.0257 0.9203 0.4177 0.051 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.0796 0.9797 0.4019 0.051 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.050(5) 1.079(7) 0.498(7) 0.14(3) Uiso 1 1 d DU . .
H14A H 0.0263 1.1316 0.4498 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.0854 1.1205 0.5276 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
H14C H 0.0317 1.0600 0.5448 0.210 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.065(2) 0.812(5) 0.574(4) 0.063(13) Uiso 1 1 d U . .
H15A H 0.0916 0.7598 0.6196 0.075 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.0591 0.8838 0.6092 0.075 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.013(3) 0.747(8) 0.550(6) 0.10(2) Uiso 1 1 d U . .
H16A H 0.0035 0.7288 0.6070 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.0170 0.6720 0.5181 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
H16C H -0.0159 0.7974 0.5087 0.153 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.193(2) 0.972(5) 0.521(4) 0.066(14) Uiso 1 1 d U . .
H18A H 0.2258 1.0069 0.5655 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.1711 1.0360 0.4814 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H18C H 0.2039 0.9119 0.4821 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.156(3) 0.909(6) 0.576(4) 0.078(15) Uiso 1 1 d U . .
H17A H 0.1487 0.9669 0.6211 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.1770 0.8396 0.6123 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.114(3) 0.771(5) 0.443(4) 0.082(16) Uiso 1 1 d DU . .
H19A H 0.0827 0.7146 0.4142 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.1462 0.7232 0.4783 0.098 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.128(5) 0.847(9) 0.363(6) 0.16(4) Uiso 1 1 d DU . .
H20A H 0.1390 0.7917 0.3206 0.247 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.1595 0.9015 0.3921 0.247 Uiso 1 1 calc R . .
H20C H 0.0961 0.8945 0.3288 0.247 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.329(3) 0.438(6) 0.280(4) 0.083(16) Uiso 1 1 d DU . .
H21A H 0.3190 0.5253 0.2747 0.099 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.3678 0.4356 0.3189 0.099 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.298(4) 0.394(8) 0.353(6) 0.10(3) Uiso 1 1 d DU . .
H22A H 0.3109 0.4418 0.4108 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H 0.3056 0.3084 0.3676 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
H22C H 0.2575 0.4055 0.3264 0.154 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.3562(16) 0.283(4) 0.193(3) 0.036(8) Uiso 1 1 d DU . .
H23A H 0.3431 0.2464 0.1294 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.3405 0.2345 0.2342 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.422(2) 0.274(12) 0.229(8) 0.16(4) Uiso 1 1 d DU . .
H24A H 0.4332 0.1884 0.2327 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.4355 0.3099 0.2917 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
H24C H 0.4380 0.3168 0.1865 0.238 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.3674(16) 0.493(3) 0.137(3) 0.035(8) Uiso 1 1 d DU . .
H25A H 0.3673 0.4496 0.0794 0.042 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.4064 0.4946 0.1776 0.042 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.3508(13) 0.628(3) 0.108(2) 0.016(6) Uiso 1 1 d U . .
H26A H 0.3756 0.6608 0.0746 0.024 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.3542 0.6766 0.1641 0.024 Uiso 1 1 calc R . .

H26C H 0.3124 0.6307 0.0674 0.024 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.2731(18) 0.415(5) 0.112(3) 0.056(11) Uiso 1 1 d DU . .
H27A H 0.2546 0.4902 0.1222 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.2520 0.3469 0.1282 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.265(2) 0.405(5) 0.001(3) 0.048(12) Uiso 1 1 d DU . .
H28A H 0.2257 0.4115 -0.0341 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.2796 0.3271 -0.0131 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
H28C H 0.2857 0.4709 -0.0181 0.072 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.8861(13) 0.574(3) 0.850(2) 0.023(7) Uiso 1 1 d DU . .
H29A H 0.9241 0.5807 0.8939 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H29B H 0.8852 0.6211 0.7937 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.8447(18) 0.633(4) 0.897(3) 0.037(10) Uiso 1 1 d DU . .
H30A H 0.8522 0.7196 0.9044 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.8495 0.5955 0.9578 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H30C H 0.8066 0.6197 0.8568 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.860(2) 0.455(4) 0.708(2) 0.092(17) Uiso 1 1 d DU . .
H31A H 0.8220 0.4333 0.6704 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.8641 0.5446 0.7065 0.110 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.9035(17) 0.393(4) 0.668(3) 0.039(9) Uiso 1 1 d DU . .
H32A H 0.8955 0.4127 0.6017 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.9015 0.3050 0.6753 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
H32C H 0.9408 0.4213 0.7022 0.059 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.865(2) 0.263(4) 0.787(4) 0.16(3) Uiso 1 1 d DU . .
H33A H 0.8745 0.2417 0.7303 0.189 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.8839 0.2089 0.8397 0.189 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.8003(17) 0.271(4) 0.771(3) 0.032(10) Uiso 1 1 d DU . .
H34A H 0.7835 0.1917 0.7531 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.7840 0.3298 0.7216 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
H34C H 0.7933 0.2975 0.8291 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.890(2) 0.389(5) 0.929(3) 0.069(13) Uiso 1 1 d DU . .
H35A H 0.8653 0.4463 0.9485 0.083 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.8753 0.3072 0.9364 0.083 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.944(2) 0.396(5) 1.003(3) 0.049(11) Uiso 1 1 d U . .
H36A H 0.9409 0.3598 1.0609 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.9551 0.4815 1.0150 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
H36C H 0.9726 0.3532 0.9833 0.074 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.8953(19) 0.892(3) 0.215(3) 0.046(10) Uiso 1 1 d DU . .
H37A H 0.9197 0.9119 0.1767 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.9055 0.9480 0.2696 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.9103(18) 0.758(3) 0.255(3) 0.036(9) Uiso 1 1 d DU . .
H38A H 0.9499 0.7536 0.2889 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.9016 0.7010 0.2025 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H38C H 0.8885 0.7380 0.2968 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.8211(16) 1.061(3) 0.155(3) 0.036(8) Uiso 1 1 d DU . .
H39A H 0.8142 1.0857 0.2138 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.7887 1.0839 0.1017 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.876(4) 1.120(7) 0.145(9) 0.18(4) Uiso 1 1 d DU . .
H40A H 0.8719 1.2082 0.1401 0.269 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.8842 1.0885 0.0897 0.269 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.9074 1.1007 0.2009 0.269 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.821(2) 0.867(4) 0.065(3) 0.057(11) Uiso 1 1 d DU . .
H41A H 0.8360 0.7833 0.0735 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.8403 0.9120 0.0267 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.759(3) 0.865(7) 0.017(5) 0.08(2) Uiso 1 1 d U . .
H42A H 0.7518 0.8257 -0.0444 0.118 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.7447 0.9476 0.0084 0.118 Uiso 1 1 calc R . .
H42C H 0.7405 0.8190 0.0548 0.118 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 0.793(2) 0.858(5) 0.218(4) 0.061(12) Uiso 1 1 d U . .
H43A H 0.7537 0.8817 0.1878 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 0.7949 0.7696 0.2108 0.073 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 0.804(3) 0.882(6) 0.320(4) 0.061(14) Uiso 1 1 d U . .
H44A H 0.7762 0.8401 0.3421 0.092 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 0.8024 0.9687 0.3303 0.092 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 0.8411 0.8512 0.3536 0.092 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 0.3114(13) 0.904(3) 0.783(2) 0.022(6) Uiso 1 1 d DU . .
H45A H 0.2886 0.9168 0.8255 0.026 Uiso 1 1 calc R . .

H45B H 0.2999 0.9648 0.7327 0.026 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 0.297(3) 0.776(5) 0.738(4) 0.058(17) Uiso 1 1 d U . .
H46A H 0.2629 0.7803 0.6854 0.087 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 0.2920 0.7187 0.7844 0.087 Uiso 1 1 calc R . .
H46C H 0.3276 0.7478 0.7150 0.087 Uiso 1 1 calc R . .
C47 C 0.4385(15) 0.922(5) 0.888(4) 0.067(14) Uiso 1 1 d DU . .
H47A H 0.4539 1.0050 0.8988 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
H47B H 0.4566 0.8793 0.8470 0.081 Uiso 1 1 calc R . .
C48 C 0.451(4) 0.854(10) 0.984(5) 0.14(4) Uiso 1 1 d DU . .
H48A H 0.4914 0.8502 1.0133 0.207 Uiso 1 1 calc R . .
H48B H 0.4362 0.7714 0.9729 0.207 Uiso 1 1 calc R . .
H48C H 0.4337 0.8969 1.0246 0.207 Uiso 1 1 calc R . .
C49 C 0.366(3) 1.008(4) 0.924(3) 0.13(2) Uiso 1 1 d DU . .
H49A H 0.3314 0.9845 0.9378 0.152 Uiso 1 1 calc R . .
H49B H 0.3977 0.9984 0.9812 0.152 Uiso 1 1 calc R . .
C50 C 0.3620(18) 1.142(3) 0.888(3) 0.025(8) Uiso 1 1 d DU . .
H50A H 0.3463 1.1932 0.9270 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
H50B H 0.3382 1.1453 0.8231 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
H50C H 0.3992 1.1713 0.8912 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
C53 C 0.339(3) 0.870(7) 0.412(5) 0.10(2) Uiso 1 1 d DU . .
H53A H 0.3572 0.9236 0.4648 0.121 Uiso 1 1 calc R . .
H53B H 0.3119 0.9189 0.3629 0.121 Uiso 1 1 calc R . .
C54 C 0.309(4) 0.763(7) 0.444(6) 0.12(3) Uiso 1 1 d DU . .
H54A H 0.2761 0.7919 0.4585 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
H54B H 0.3347 0.7253 0.4994 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
H54C H 0.2982 0.7025 0.3936 0.186 Uiso 1 1 calc R . .
C55 C 0.402(3) 0.911(7) 0.328(5) 0.092(18) Uiso 1 1 d U . .
H55A H 0.4158 0.9702 0.3792 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
H55B H 0.3684 0.9462 0.2839 0.111 Uiso 1 1 calc R . .
C56 C 0.4511(19) 0.905(4) 0.270(3) 0.045(10) Uiso 1 1 d U . .
H56A H 0.4515 0.9824 0.2379 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
H56B H 0.4420 0.8397 0.2242 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
H56C H 0.4877 0.8909 0.3148 0.068 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.0968(13) 0.859(3) 0.507(2) 0.031(6) Uiso 1 1 d DU . .
N2 N 0.3339(12) 0.414(3) 0.188(2) 0.024(7) Uiso 1 1 d DU . .
N3 N 0.873(2) 0.407(4) 0.814(2) 0.076(13) Uiso 1 1 d DU . .
N4 N 0.8322(16) 0.924(3) 0.154(3) 0.041(9) Uiso 1 1 d DU . .
N5 N 0.3747(13) 0.928(3) 0.840(2) 0.024(7) Uiso 1 1 d DU . .
O81 O 0.385(2) 0.801(5) 0.369(3) 0.094(13) Uiso 1 1 d U . .
O1 O -0.0016(9) 0.0920(19) 0.2514(14) 0.018(4) Uiso 1 1 d U . .
O2 O 0.0632(13) 0.258(3) 0.175(2) 0.048(7) Uiso 1 1 d U . .
O3 O 0.1163(12) 0.080(3) 0.2567(19) 0.039(6) Uiso 1 1 d U . .
O4 O 0.1646(9) 0.262(2) 0.1872(15) 0.022(5) Uiso 1 1 d U . .
O5 O 0.2248(18) 0.095(4) 0.320(3) 0.076(11) Uiso 1 1 d U . .
O6 O 0.2250(8) 0.0740(18) 0.1461(14) 0.015(4) Uiso 1 1 d U . .
O7 O 0.3243(11) 0.011(3) 0.0972(18) 0.037(6) Uiso 1 1 d U . .
O8 O 0.2232(8) 0.0820(17) -0.0375(13) 0.011(4) Uiso 1 1 d U . .
O9 O 0.2045(10) 0.110(2) -0.2553(17) 0.030(5) Uiso 1 1 d U . .
O10 O 0.1499(11) 0.271(2) -0.1720(17) 0.030(5) Uiso 1 1 d U . .
O11 O 0.0967(16) 0.082(4) -0.259(3) 0.064(9) Uiso 1 1 d U . .
O12 O 0.0427(8) 0.2667(18) -0.1886(14) 0.016(4) Uiso 1 1 d U . .
O13 O -0.0235(13) 0.121(3) -0.326(2) 0.023(7) Uiso 1 1 d U . .
O14 O -0.0226(16) 0.093(4) -0.152(3) 0.028(9) Uiso 1 1 d U . .
O15 O -0.1170(11) 0.025(2) -0.094(2) 0.012(6) Uiso 1 1 d U . .
O16 O -0.0129(9) 0.083(2) 0.0582(18) 0.008(4) Uiso 1 1 d U . .
O17 O 0.1052(16) 0.074(3) 0.084(3) 0.027(10) Uiso 1 1 d U . .
O18 O 0.093(2) 0.080(5) -0.116(3) 0.079(18) Uiso 1 1 d U . .
O19 O 0.1628(14) -0.099(3) 0.036(2) 0.026(10) Uiso 1 1 d U . .
O20 O 0.0433(19) -0.098(4) -0.014(3) 0.041(13) Uiso 1 1 d U . .
O21 O 0.0373(18) -0.096(4) 0.155(3) 0.043(12) Uiso 1 1 d U . .
O22 O 0.1821(16) -0.108(4) 0.214(3) 0.040(10) Uiso 1 1 d U . .
O23 O 0.2561(16) -0.162(3) 0.159(3) 0.036(10) Uiso 1 1 d U . .
O24 O 0.2477(17) -0.161(4) -0.026(3) 0.026(10) Uiso 1 1 d U . .
O25 O 0.172(2) -0.090(5) -0.155(3) 0.058(16) Uiso 1 1 d U . .
O26 O 0.033(2) -0.085(5) -0.237(3) 0.067(15) Uiso 1 1 d U . .
O27 O -0.0506(13) -0.156(3) -0.163(2) 0.032(9) Uiso 1 1 d U . .

O28 O -0.0424(8) -0.1489(18) 0.0326(13) 0.001(3) Uiso 1 1 d U . .
O29 O 0.0058(18) -0.349(4) 0.129(3) 0.057(11) Uiso 1 1 d U . .
O30 O 0.1093(12) -0.260(3) 0.115(2) 0.017(7) Uiso 1 1 d U . .
O31 O 0.2124(11) -0.354(2) 0.225(2) 0.015(6) Uiso 1 1 d U . .
O32 O 0.180(3) -0.301(5) 0.032(3) 0.12(2) Uiso 1 1 d DU . .
O33 O 0.1993(13) -0.354(3) -0.137(2) 0.033(7) Uiso 1 1 d U . .
O34 O 0.104(2) -0.261(5) -0.107(4) 0.080(19) Uiso 1 1 d U . .
O35 O -0.0164(16) -0.340(3) -0.231(3) 0.043(9) Uiso 1 1 d U . .
O36 O 0.0152(14) -0.312(3) -0.041(2) 0.027(8) Uiso 1 1 d U . .
O37 O 0.1064(11) 0.435(2) 0.096(2) 0.017(6) Uiso 1 1 d U . .
O38 O 0.0988(13) 0.415(3) -0.071(2) 0.032(8) Uiso 1 1 d U . .
O39 O 0.010(3) 0.289(5) -0.492(4) 0.18(3) Uiso 1 1 d DU . .
O40 O -0.001(3) 0.470(6) -0.450(6) 0.19(3) Uiso 1 1 d DU . .
O41 O 0.5012(14) 0.619(3) 0.236(2) 0.051(8) Uiso 1 1 d U . .
O42 O 0.5544(9) 0.7634(19) 0.1473(15) 0.015(4) Uiso 1 1 d U . .
O43 O 0.6160(8) 0.5722(18) 0.2803(14) 0.010(4) Uiso 1 1 d U . .
O44 O 0.6695(10) 0.762(2) 0.2126(16) 0.023(5) Uiso 1 1 d U . .
O45 O 0.7349(10) 0.600(2) 0.3434(16) 0.022(5) Uiso 1 1 d U . .
O46 O 0.7305(14) 0.588(3) 0.136(2) 0.049(8) Uiso 1 1 d U . .
O47 O 0.8253(12) 0.524(3) 0.079(2) 0.038(6) Uiso 1 1 d U . .
O48 O 0.7152(12) 0.579(3) -0.0662(19) 0.036(6) Uiso 1 1 d U . .
O49 O 0.7075(12) 0.612(3) -0.2354(19) 0.035(6) Uiso 1 1 d U . .
O50 O 0.6485(11) 0.759(2) -0.1451(17) 0.027(5) Uiso 1 1 d U . .
O51 O 0.5889(8) 0.5901(17) -0.2818(13) 0.007(3) Uiso 1 1 d U . .
O52 O 0.5415(13) 0.775(3) -0.216(2) 0.041(7) Uiso 1 1 d U . .
O53 O 0.4715(19) 0.605(4) -0.348(3) 0.052(13) Uiso 1 1 d U . .
O54 O 0.479(2) 0.581(5) -0.133(3) 0.048(13) Uiso 1 1 d U . .
O55 O 0.382(2) 0.527(5) -0.072(3) 0.061(15) Uiso 1 1 d U . .
O56 O 0.486(2) 0.595(4) 0.028(3) 0.071(15) Uiso 1 1 d U . .
O57 O 0.6061(14) 0.566(3) 0.104(2) 0.019(8) Uiso 1 1 d U . .
O58 O 0.6003(9) 0.5700(19) -0.0904(17) 0.003(4) Uiso 1 1 d U . .
O59 O 0.6588(11) 0.402(2) 0.013(2) 0.011(6) Uiso 1 1 d U . .
O60 O 0.5497(14) 0.410(3) -0.029(2) 0.018(8) Uiso 1 1 d U . .
O61 O 0.5434(16) 0.402(3) 0.182(3) 0.033(9) Uiso 1 1 d U . .
O62 O 0.6816(11) 0.412(2) 0.235(2) 0.015(6) Uiso 1 1 d U . .
O63 O 0.7613(14) 0.355(3) 0.142(2) 0.025(8) Uiso 1 1 d U . .
O64 O 0.749(2) 0.359(5) -0.036(3) 0.042(15) Uiso 1 1 d U . .
O65 O 0.6633(13) 0.415(3) -0.177(2) 0.017(7) Uiso 1 1 d U . .
O66 O 0.5231(10) 0.410(2) -0.2229(17) 0.007(5) Uiso 1 1 d U . .
O67 O 0.4491(11) 0.352(2) -0.136(2) 0.018(6) Uiso 1 1 d U . .
O68 O 0.448(2) 0.314(5) 0.031(4) 0.101(19) Uiso 1 1 d U . .
O69 O 0.5086(13) 0.155(3) 0.163(2) 0.031(7) Uiso 1 1 d U . .
O70 O 0.6084(16) 0.238(4) 0.138(3) 0.038(11) Uiso 1 1 d U . .
O71 O 0.717(2) 0.152(5) 0.252(3) 0.065(16) Uiso 1 1 d U . .
O72 O 0.6914(10) 0.174(2) 0.0361(14) 0.011(4) Uiso 1 1 d U . .
O73 O 0.6990(12) 0.165(3) -0.167(2) 0.027(7) Uiso 1 1 d U . .
O74 O 0.5940(12) 0.241(2) -0.130(2) 0.015(6) Uiso 1 1 d U . .
O75 O 0.5004(17) 0.156(3) -0.240(3) 0.044(9) Uiso 1 1 d U . .
O76 O 0.5189(19) 0.162(4) -0.024(3) 0.050(13) Uiso 1 1 d U . .
O77 O 0.6078(15) 0.912(3) 0.073(3) 0.044(10) Uiso 1 1 d U . .
O78 O 0.6000(14) 0.939(3) -0.095(2) 0.034(8) Uiso 1 1 d U . .
O79 O 0.725(3) 0.906(6) 0.416(5) 0.15(2) Uiso 1 1 d DU . .
O80 O 0.6942(18) 0.795(4) 0.503(3) 0.080(11) Uiso 1 1 d DU . .
Si1 Si 0.1031(6) -0.0108(14) 0.0062(12) 0.013(4) Uiso 1 1 d U . .
Si2 Si 0.6033(9) 0.4951(19) -0.0087(14) 0.035(6) Uiso 1 1 d U . .
P1 P 0.1139(7) 0.3379(15) 0.1803(12) 0.030(4) Uiso 1 1 d DU . .
P2 P 0.0963(7) 0.3488(15) -0.1630(13) 0.024(4) Uiso 1 1 d DU . .
P3 P 0.6090(7) 0.8463(15) 0.1626(12) 0.028(4) Uiso 1 1 d U . .
P4 P 0.5950(10) 0.849(2) -0.1788(15) 0.045(7) Uiso 1 1 d U . .
W1 W 0.0382(4) 0.0882(8) 0.1649(6) 0.0248(9) Uani 1 1 d U . .
W2 W 0.1857(4) 0.0693(8) 0.2376(6) 0.0242(9) Uani 1 1 d U . .
W3 W 0.2539(3) -0.0242(6) 0.0706(4) 0.0271(9) Uiso 1 1 d U . .
W4 W 0.1642(3) 0.0826(6) -0.1750(5) 0.0362(15) Uani 1 1 d U . .
W5 W 0.0246(3) 0.0898(8) -0.2289(5) 0.0330(14) Uani 1 1 d U . .
W6 W -0.0434(4) -0.0250(8) -0.0516(6) 0.0251(9) Uani 1 1 d U . .
W7 W 0.0230(4) -0.2281(8) 0.0771(7) 0.0335(10) Uani 1 1 d U . .

```
W8 W 0.1872(3) -0.2388(7) 0.1587(5) 0.0345(11) Uiso 1 1 d DU . .
W9 W 0.1790(3) -0.2363(6) -0.0861(6) 0.0415(17) Uani 1 1 d DU . .
W10 W 0.0188(3) -0.2348(7) -0.1496(6) 0.0429(17) Uani 1 1 d U . .
W11 W 0.5457(4) 0.5691(7) 0.1822(6) 0.0215(8) Uani 1 1 d U . .
W12 W 0.6772(4) 0.5858(9) 0.2222(7) 0.0306(11) Uani 1 1 d U . .
W13 W 0.7538(3) 0.4845(6) 0.0501(4) 0.0260(6) Uani 1 1 d U . .
W14 W 0.6643(3) 0.5865(7) -0.1739(5) 0.0379(16) Uani 1 1 d U . .
W15 W 0.5253(3) 0.5824(8) -0.2329(6) 0.0429(16) Uani 1 1 d U . .
W16 W 0.4484(4) 0.4915(8) -0.0688(7) 0.0267(9) Uani 1 1 d U . .
W17 W 0.5309(4) 0.2523(7) 0.0922(6) 0.0266(8) Uani 1 1 d U . .
W18 W 0.6878(3) 0.2600(6) 0.1382(5) 0.0308(7) Uani 1 1 d U . .
W19 W 0.6790(3) 0.2650(7) -0.0834(5) 0.0427(18) Uani 1 1 d U . .
W20 W 0.5184(3) 0.2678(7) -0.1467(6) 0.0430(18) Uani 1 1 d U . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
W1 0.0140(18) 0.0199(19) 0.035(2) 0.0171(12) -0.0019(15) 0.0106(11)
W2 0.013(2) 0.0237(19) 0.027(2) 0.0021(15) -0.0074(15) 0.0123(12)
W4 0.030(2) 0.0166(16) 0.074(3) 0.0048(14) 0.0334(17) 0.0081(12)
W5 0.0200(19) 0.045(3) 0.0242(17) -0.0134(15) -0.0086(12) 0.0002(15)
W6 0.0118(19) 0.0217(19) 0.033(2) 0.0058(14) -0.0068(15) 0.0088(11)
W7 0.021(2) 0.016(2) 0.057(3) 0.0197(14) 0.0029(17) 0.0091(12)
W9 0.037(2) 0.0128(18) 0.087(3) -0.0019(16) 0.036(2) 0.0076(14)
W10 0.035(2) 0.021(2) 0.083(3) -0.0036(18) 0.033(2) 0.0019(16)
W11 0.0147(16) 0.0152(18) 0.028(2) 0.0094(14) -0.0032(15) 0.0120(11)
W12 0.0113(19) 0.029(2) 0.042(3) 0.0096(15) -0.0067(17) 0.0105(13)
W13 0.0158(9) 0.0306(13) 0.0322(18) 0.0033(13) 0.0080(12) 0.0051(6)
W14 0.0238(19) 0.049(3) 0.0286(19) -0.0156(16) -0.0106(13) -0.0074
(16)
W15 0.029(2) 0.028(2) 0.078(3) 0.0044(19) 0.026(2) -0.0010(15)
W16 0.0082(19) 0.0246(19) 0.039(3) 0.0132(14) -0.0049(16) 0.0074(12)
W17 0.0202(18) 0.0102(18) 0.043(2) 0.0105(14) -0.0005(15) 0.0096(11)
W18 0.0260(11) 0.0228(11) 0.045(2) 0.0025(13) 0.0132(15) 0.0112(6)
W19 0.027(2) 0.045(3) 0.043(2) -0.0171(18) -0.0076(15) -0.0035(18)
W20 0.028(2) 0.043(3) 0.046(2) -0.0197(19) -0.0087(16) -0.0143(18)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.60(5) . ?
C1 P1 1.65(6) . ?
```

C4 C5 1.55(5) . ?
C4 P2 1.84(7) . ?
C4 H4A 0.9700 . ?
C4 H4B 0.9700 . ?
C5 C6 1.51(5) . ?
C5 H5A 0.9700 . ?
C5 H5B 0.9700 . ?
C6 O40 1.24(5) . ?
C6 O39 1.31(5) . ?
C7 C8 1.56(3) . ?
C7 P3 1.88(3) . ?
C7 H7A 0.9700 . ?
C7 H7B 0.9700 . ?
C8 C9 1.51(4) . ?
C8 H8A 0.9700 . ?
C8 H8B 0.9700 . ?
C9 O80 1.26(5) . ?
C9 O79 1.36(6) . ?
C10 C11 1.57(5) . ?
C10 P4 1.78(4) . ?
C10 H10A 0.9700 . ?
C10 H10B 0.9700 . ?
C11 C12 1.46(4) . ?
C11 H11 0.9300 . ?
C12 H12A 0.9300 . ?
C12 H12B 0.9300 . ?
C13 N1 1.45(5) . ?
C13 C14 1.57(5) . ?
C13 H13A 0.9700 . ?
C13 H13B 0.9700 . ?
C14 H14A 0.9600 . ?
C14 H14B 0.9600 . ?
C14 H14C 0.9600 . ?
C15 C16 1.40(9) . ?
C15 N1 1.53(6) . ?
C15 H15A 0.9700 . ?
C15 H15B 0.9700 . ?
C16 H16A 0.9600 . ?
C16 H16B 0.9600 . ?
C16 H16C 0.9600 . ?
C18 C17 1.55(8) . ?
C18 H18A 0.9600 . ?
C18 H18B 0.9600 . ?
C18 H18C 0.9600 . ?
C17 N1 1.61(7) . ?
C17 H17A 0.9700 . ?
C17 H17B 0.9700 . ?
C19 N1 1.49(4) . ?
C19 C20 1.56(5) . ?
C19 H19A 0.9700 . ?
C19 H19B 0.9700 . ?
C20 H20A 0.9600 . ?
C20 H20B 0.9600 . ?
C20 H20C 0.9600 . ?
C21 N2 1.42(7) . ?
C21 C22 1.57(5) . ?
C21 H21A 0.9700 . ?
C21 H21B 0.9700 . ?
C22 H22A 0.9600 . ?
C22 H22B 0.9600 . ?
C22 H22C 0.9600 . ?
C23 N2 1.52(5) . ?
C23 C24 1.56(5) . ?
C23 H23A 0.9700 . ?
C23 H23B 0.9700 . ?
C24 H24A 0.9600 . ?

C24 H24B 0.9600 . ?
C24 H24C 0.9600 . ?
C25 N2 1.54(4) . ?
C25 C26 1.54(5) . ?
C25 H25A 0.9700 . ?
C25 H25B 0.9700 . ?
C26 H26A 0.9600 . ?
C26 H26B 0.9600 . ?
C26 H26C 0.9600 . ?
C27 N2 1.58(4) . ?
C27 C28 1.60(4) . ?
C27 H27A 0.9700 . ?
C27 H27B 0.9700 . ?
C28 H28A 0.9600 . ?
C28 H28B 0.9600 . ?
C28 H28C 0.9600 . ?
C29 C30 1.53(3) . ?
C29 N3 1.88(5) . ?
C29 H29A 0.9700 . ?
C29 H29B 0.9700 . ?
C30 H30A 0.9600 . ?
C30 H30B 0.9600 . ?
C30 H30C 0.9600 . ?
C31 C32 1.52(3) . ?
C31 N3 1.59(3) . ?
C31 H31A 0.9700 . ?
C31 H31B 0.9700 . ?
C32 H32A 0.9600 . ?
C32 H32B 0.9600 . ?
C32 H32C 0.9600 . ?
C33 C34 1.54(3) . ?
C33 N3 1.61(3) . ?
C33 H33A 0.9700 . ?
C33 H33B 0.9700 . ?
C34 H34A 0.9600 . ?
C34 H34B 0.9600 . ?
C34 H34C 0.9600 . ?
C35 C36 1.47(7) . ?
C35 N3 1.62(3) . ?
C35 H35A 0.9700 . ?
C35 H35B 0.9700 . ?
C36 H36A 0.9600 . ?
C36 H36B 0.9600 . ?
C36 H36C 0.9600 . ?
C37 C38 1.56(3) . ?
C37 N4 1.59(6) . ?
C37 H37A 0.9700 . ?
C37 H37B 0.9700 . ?
C38 H38A 0.9600 . ?
C38 H38B 0.9600 . ?
C38 H38C 0.9600 . ?
C39 N4 1.51(4) . ?
C39 C40 1.56(5) . ?
C39 H39A 0.9700 . ?
C39 H39B 0.9700 . ?
C40 H40A 0.9600 . ?
C40 H40B 0.9600 . ?
C40 H40C 0.9600 . ?
C41 N4 1.40(6) . ?
C41 C42 1.49(9) . ?
C41 H41A 0.9700 . ?
C41 H41B 0.9700 . ?
C42 H42A 0.9600 . ?
C42 H42B 0.9600 . ?
C42 H42C 0.9600 . ?
C43 C44 1.45(8) . ?

```
C43 N4 1.70(6) . ?
C43 H43A 0.9700 . ?
C43 H43B 0.9700 . ?
C44 H44A 0.9600 . ?
C44 H44B 0.9600 . ?
C44 H44C 0.9600 . ?
C45 C46 1.53(7) . ?
C45 N5 1.56(5) . ?
C45 H45A 0.9700 . ?
C45 H45B 0.9700 . ?
C46 H46A 0.9600 . ?
C46 H46B 0.9600 . ?
C46 H46C 0.9600 . ?
C47 N5 1.53(2) . ?
C47 C48 1.54(3) . ?
C47 H47A 0.9700 . ?
C47 H47B 0.9700 . ?
C48 H48A 0.9600 . ?
C48 H48B 0.9600 . ?
C48 H48C 0.9600 . ?
C49 C50 1.54(3) . ?
C49 N5 1.58(4) . ?
C49 H49A 0.9700 . ?
C49 H49B 0.9700 . ?
C50 H50A 0.9600 . ?
C50 H50B 0.9600 . ?
C50 H50C 0.9600 . ?
C53 C54 1.52(3) . ?
C53 O81 1.66(9) . ?
C53 H53A 0.9700 . ?
C53 H53B 0.9700 . ?
C54 H54A 0.9600 . ?
C54 H54B 0.9600 . ?
C54 H54C 0.9600 . ?
C55 O81 1.46(8) . ?
C55 C56 1.67(8) . ?
C55 H55A 0.9700 . ?
C55 H55B 0.9700 . ?
C56 H56A 0.9600 . ?
C56 H56B 0.9600 . ?
C56 H56C 0.9600 . ?
O1 W1 1.83(2) . ?
O2 P1 1.51(3) . ?
O2 W1 1.93(3) . ?
O3 W2 1.83(3) . ?
O3 W1 2.00(3) . ?
O4 P1 1.48(2) . ?
O4 W2 2.22(2) . ?
O5 W2 1.33(4) . ?
O6 W3 1.83(2) . ?
O6 W2 1.881(19) . ?
O7 W3 1.71(3) . ?
O8 W3 1.925(18) . ?
O8 W4 2.110(18) . ?
O9 W4 1.78(2) . ?
O10 P2 1.61(3) . ?
O10 W4 2.07(2) . ?
O11 W4 1.75(4) . ?
O11 W5 1.96(4) . ?
O12 P2 1.55(2) . ?
O12 W5 2.02(2) . ?
O13 W5 1.60(3) . ?
O14 W5 1.86(4) . ?
O14 W6 2.13(4) . ?
O15 W6 1.82(3) . ?
O16 W1 1.70(2) . ?
```

```
O16 W6 1.95(2) . ?
O17 Si1 1.46(4) . ?
O17 W1 2.32(4) . ?
O18 Si1 1.99(5) . ?
O18 W5 1.99(5) . ?
O18 W4 2.19(5) . ?
O19 Si1 1.70(4) . ?
O19 W8 2.29(3) . ?
O19 W3 2.30(3) . ?
O19 W9 2.45(3) . ?
O20 Si1 1.71(5) . ?
O20 W7 2.11(4) . ?
O20 W6 2.20(4) . ?
O20 W10 2.41(4) . ?
O21 W7 1.80(4) . ?
O21 W1 2.00(4) . ?
O22 W8 1.66(4) . ?
O22 W2 1.94(4) . ?
O23 W8 1.89(4) . ?
O23 W3 1.97(4) . ?
O24 W9 1.86(4) . ?
O24 W3 2.02(4) . ?
O25 W9 1.85(5) . ?
O25 W4 1.90(5) . ?
O26 W5 1.91(5) . ?
O26 W10 2.16(5) . ?
O27 W10 1.87(3) . ?
O27 W6 2.13(3) . ?
O28 W7 1.774(19) . ?
O28 W6 1.82(2) . ?
O29 W7 1.64(4) . ?
O30 W8 1.85(3) . ?
O30 W7 2.07(3) . ?
O31 W8 1.59(3) . ?
O32 W9 1.86(4) . ?
O32 W8 1.94(4) . ?
O33 W9 1.63(3) . ?
O34 W9 1.81(6) . ?
O34 W10 2.03(6) . ?
O35 W10 1.70(4) . ?
O36 W10 1.83(4) . ?
O36 W7 1.91(3) . ?
O37 P1 1.60(3) . ?
O38 P2 1.51(4) . ?
O41 W11 1.63(3) . ?
O42 P3 1.58(2) . ?
O42 W11 2.19(2) . ?
O43 W11 1.90(2) . ?
O43 W12 1.95(2) . ?
O44 P3 1.72(3) . ?
O44 W12 1.92(2) . ?
O45 W12 1.93(2) . ?
O46 W13 1.90(3) . ?
O46 W12 2.09(3) . ?
O47 W13 1.74(3) . ?
O48 W14 1.70(3) . ?
O48 W13 1.98(3) . ?
O49 W14 1.62(3) . ?
O50 P4 1.60(3) . ?
O50 W14 1.98(2) . ?
O51 W15 1.918(19) . ?
O51 W14 2.056(18) . ?
O52 P4 1.50(4) . ?
O52 W15 2.12(3) . ?
O53 W15 1.83(4) . ?
O54 W16 1.68(5) . ?
```

```
O54 W15 2.11(5) . ?
O55 W16 1.68(5) . ?
O56 W16 1.83(5) . ?
O56 W11 2.33(5) . ?
O57 Si2 1.81(4) . ?
O57 W12 2.08(3) . ?
O57 W11 2.14(3) . ?
O58 Si2 1.43(3) . ?
O58 W14 2.28(2) . ?
O58 W15 2.35(2) . ?
O59 Si2 1.65(3) . ?
O59 W19 2.21(3) . ?
O59 W18 2.34(3) . ?
O59 W13 2.42(3) . ?
O60 Si2 1.57(4) . ?
O60 W20 2.27(3) . ?
O61 W11 1.81(4) . ?
O61 W17 2.06(4) . ?
O62 W12 1.89(3) . ?
O62 W18 2.21(3) . ?
O63 W13 1.92(3) . ?
O63 W18 2.07(3) . ?
O64 W13 1.84(5) . ?
O64 W19 1.96(5) . ?
O65 W14 1.86(3) . ?
O65 W19 2.09(3) . ?
O66 W15 1.87(2) . ?
O66 W20 1.93(2) . ?
O67 W16 1.80(3) . ?
O67 W20 1.99(3) . ?
O68 W17 2.08(6) . ?
O68 W16 2.42(6) . ?
O69 W17 1.69(3) . ?
O70 W17 1.84(4) . ?
O70 W18 1.98(4) . ?
O71 W18 1.99(5) . ?
O72 W18 1.79(2) . ?
O72 W19 1.96(2) . ?
O73 W19 1.82(3) . ?
O74 W20 1.83(3) . ?
O74 W19 2.03(3) . ?
O75 W20 1.78(4) . ?
O76 W17 1.92(4) . ?
O76 W20 2.13(4) . ?
O77 P3 1.49(4) . ?
O78 P4 1.55(4) . ?
W6 W7 3.043(7) . ?
W11 W12 3.132(11) . ?
W18 W19 3.201(8) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 111(5) . . ?
C5 C4 P2 111(6) . . ?
C5 C4 H4A 109.4 . . ?
P2 C4 H4A 109.4 . . ?
C5 C4 H4B 109.4 . . ?
P2 C4 H4B 109.4 . . ?
H4A C4 H4B 108.0 . . ?
C6 C5 C4 140(8) . . ?
```

```
C6 C5 H5A 102.0 . . ?
C4 C5 H5A 102.0 . . ?
C6 C5 H5B 102.0 . . ?
C4 C5 H5B 102.0 . . ?
H5A C5 H5B 104.7 . . ?
O40 C6 O39 110(4) . . ?
O40 C6 C5 99(6) . . ?
O39 C6 C5 113(5) . . ?
C8 C7 P3 116(2) . . ?
C8 C7 H7A 108.2 . . ?
P3 C7 H7A 108.2 . . ?
C8 C7 H7B 108.2 . . ?
P3 C7 H7B 108.2 . . ?
H7A C7 H7B 107.4 . . ?
C9 C8 C7 109(3) . . ?
C9 C8 H8A 109.9 . . ?
C7 C8 H8A 109.9 . . ?
C9 C8 H8B 109.9 . . ?
C7 C8 H8B 109.9 . . ?
H8A C8 H8B 108.3 . . ?
O80 C9 O79 105(3) . . ?
O80 C9 C8 121(4) . . ?
O79 C9 C8 124(4) . . ?
C11 C10 P4 113(3) . . ?
C11 C10 H10A 108.9 . . ?
P4 C10 H10A 108.9 . . ?
C11 C10 H10B 108.9 . . ?
P4 C10 H10B 108.9 . . ?
H10A C10 H10B 107.7 . . ?
C12 C11 C10 108(4) . . ?
C12 C11 H11 125.8 . . ?
C10 C11 H11 125.8 . . ?
C11 C12 H12A 120.0 . . ?
C11 C12 H12B 120.0 . . ?
H12A C12 H12B 120.0 . . ?
N1 C13 C14 121(5) . . ?
N1 C13 H13A 107.0 . . ?
C14 C13 H13A 107.0 . . ?
N1 C13 H13B 107.0 . . ?
C14 C13 H13B 107.0 . . ?
H13A C13 H13B 106.7 . . ?
C13 C14 H14A 109.5 . . ?
C13 C14 H14B 109.5 . . ?
H14A C14 H14B 109.5 . . ?
C13 C14 H14C 109.5 . . ?
H14A C14 H14C 109.5 . . ?
H14B C14 H14C 109.5 . . ?
C16 C15 N1 128(5) . . ?
C16 C15 H15A 105.4 . . ?
N1 C15 H15A 105.4 . . ?
C16 C15 H15B 105.4 . . ?
N1 C15 H15B 105.4 . . ?
H15A C15 H15B 106.0 . . ?
C15 C16 H16A 109.5 . . ?
C15 C16 H16B 109.5 . . ?
H16A C16 H16B 109.5 . . ?
C15 C16 H16C 109.5 . . ?
H16A C16 H16C 109.5 . . ?
H16B C16 H16C 109.5 . . ?
C17 C18 H18A 109.5 . . ?
C17 C18 H18B 109.5 . . ?
H18A C18 H18B 109.5 . . ?
C17 C18 H18C 109.5 . . ?
H18A C18 H18C 109.5 . . ?
H18B C18 H18C 109.5 . . ?
C18 C17 N1 112(4) . . ?
```

```
C18 C17 H17A 109.1 . . ?
N1 C17 H17A 109.1 . . ?
C18 C17 H17B 109.1 . . ?
N1 C17 H17B 109.1 . . ?
H17A C17 H17B 107.9 . . ?
N1 C19 C20 108(4) . . ?
N1 C19 H19A 110.1 . . ?
C20 C19 H19A 110.1 . . ?
N1 C19 H19B 110.1 . . ?
C20 C19 H19B 110.1 . . ?
H19A C19 H19B 108.4 . . ?
C19 C20 H20A 109.5 . . ?
C19 C20 H20B 109.5 . . ?
H20A C20 H20B 109.5 . . ?
C19 C20 H20C 109.5 . . ?
H20A C20 H20C 109.5 . . ?
H20B C20 H20C 109.5 . . ?
N2 C21 C22 143(6) . . ?
N2 C21 H21A 101.2 . . ?
C22 C21 H21A 101.2 . . ?
N2 C21 H21B 101.2 . . ?
C22 C21 H21B 101.2 . . ?
H21A C21 H21B 104.5 . . ?
C21 C22 H22A 109.5 . . ?
C21 C22 H22B 109.5 . . ?
H22A C22 H22B 109.5 . . ?
C21 C22 H22C 109.5 . . ?
H22A C22 H22C 109.5 . . ?
H22B C22 H22C 109.5 . . ?
N2 C23 C24 114(5) . . ?
N2 C23 H23A 108.8 . . ?
C24 C23 H23A 108.8 . . ?
N2 C23 H23B 108.8 . . ?
C24 C23 H23B 108.8 . . ?
H23A C23 H23B 107.7 . . ?
C23 C24 H24A 109.5 . . ?
C23 C24 H24B 109.5 . . ?
H24A C24 H24B 109.5 . . ?
C23 C24 H24C 109.5 . . ?
H24A C24 H24C 109.5 . . ?
H24B C24 H24C 109.5 . . ?
N2 C25 C26 122(3) . . ?
N2 C25 H25A 106.9 . . ?
C26 C25 H25A 106.9 . . ?
N2 C25 H25B 106.9 . . ?
C26 C25 H25B 106.9 . . ?
H25A C25 H25B 106.7 . . ?
C25 C26 H26A 109.5 . . ?
C25 C26 H26B 109.5 . . ?
H26A C26 H26B 109.5 . . ?
C25 C26 H26C 109.5 . . ?
H26A C26 H26C 109.5 . . ?
H26B C26 H26C 109.5 . . ?
N2 C27 C28 121(4) . . ?
N2 C27 H27A 107.0 . . ?
C28 C27 H27A 107.0 . . ?
N2 C27 H27B 107.0 . . ?
C28 C27 H27B 107.0 . . ?
H27A C27 H27B 106.7 . . ?
C27 C28 H28A 109.5 . . ?
C27 C28 H28B 109.5 . . ?
H28A C28 H28B 109.5 . . ?
C27 C28 H28C 109.5 . . ?
H28A C28 H28C 109.5 . . ?
H28B C28 H28C 109.5 . . ?
C30 C29 N3 117(3) . . ?
```

```
C30 C29 H29A 108.1 . . ?
N3 C29 H29A 108.1 . . ?
C30 C29 H29B 108.1 . . ?
N3 C29 H29B 108.1 . . ?
H29A C29 H29B 107.3 . . ?
C29 C30 H30A 109.5 . . ?
C29 C30 H30B 109.5 . . ?
H30A C30 H30B 109.5 . . ?
C29 C30 H30C 109.5 . . ?
H30A C30 H30C 109.5 . . ?
H30B C30 H30C 109.5 . . ?
C32 C31 N3 106(3) . . ?
C32 C31 H31A 110.6 . . ?
N3 C31 H31A 110.6 . . ?
C32 C31 H31B 110.6 . . ?
N3 C31 H31B 110.6 . . ?
H31A C31 H31B 108.7 . . ?
C31 C32 H32A 109.5 . . ?
C31 C32 H32B 109.5 . . ?
H32A C32 H32B 109.5 . . ?
C31 C32 H32C 109.5 . . ?
H32A C32 H32C 109.5 . . ?
H32B C32 H32C 109.5 . . ?
C34 C33 N3 92(3) . . ?
C34 C33 H33A 113.3 . . ?
N3 C33 H33A 113.3 . . ?
C34 C33 H33B 113.3 . . ?
N3 C33 H33B 113.3 . . ?
H33A C33 H33B 110.6 . . ?
C33 C34 H34A 109.5 . . ?
C33 C34 H34B 109.5 . . ?
H34A C34 H34B 109.5 . . ?
C33 C34 H34C 109.5 . . ?
H34A C34 H34C 109.5 . . ?
H34B C34 H34C 109.5 . . ?
C36 C35 N3 131(5) . . ?
C36 C35 H35A 104.5 . . ?
N3 C35 H35A 104.5 . . ?
C36 C35 H35B 104.5 . . ?
N3 C35 H35B 104.5 . . ?
H35A C35 H35B 105.7 . . ?
C35 C36 H36A 109.5 . . ?
C35 C36 H36B 109.5 . . ?
H36A C36 H36B 109.5 . . ?
C35 C36 H36C 109.5 . . ?
H36A C36 H36C 109.5 . . ?
H36B C36 H36C 109.5 . . ?
C38 C37 N4 119(3) . . ?
C38 C37 H37A 107.4 . . ?
N4 C37 H37A 107.4 . . ?
C38 C37 H37B 107.4 . . ?
N4 C37 H37B 107.4 . . ?
H37A C37 H37B 107.0 . . ?
C37 C38 H38A 109.5 . . ?
C37 C38 H38B 109.5 . . ?
H38A C38 H38B 109.5 . . ?
C37 C38 H38C 109.5 . . ?
H38A C38 H38C 109.5 . . ?
H38B C38 H38C 109.5 . . ?
N4 C39 C40 104(3) . . ?
N4 C39 H39A 111.0 . . ?
C40 C39 H39A 111.0 . . ?
N4 C39 H39B 111.0 . . ?
C40 C39 H39B 111.0 . . ?
H39A C39 H39B 109.0 . . ?
C39 C40 H40A 109.5 . . ?
```

C39 C40 H40B 109.5 . . ?
H40A C40 H40B 109.5 . . ?
C39 C40 H40C 109.5 . . ?
H40A C40 H40C 109.5 . . ?
H40B C40 H40C 109.5 . . ?
N4 C41 C42 110(4) . . ?
N4 C41 H41A 109.7 . . ?
C42 C41 H41A 109.7 . . ?
N4 C41 H41B 109.7 . . ?
C42 C41 H41B 109.7 . . ?
H41A C41 H41B 108.2 . . ?
C41 C42 H42A 109.5 . . ?
C41 C42 H42B 109.5 . . ?
H42A C42 H42B 109.5 . . ?
C41 C42 H42C 109.5 . . ?
H42A C42 H42C 109.5 . . ?
H42B C42 H42C 109.5 . . ?
C44 C43 N4 122(5) . . ?
C44 C43 H43A 106.9 . . ?
N4 C43 H43A 106.9 . . ?
C44 C43 H43B 106.9 . . ?
N4 C43 H43B 106.9 . . ?
H43A C43 H43B 106.7 . . ?
C43 C44 H44A 109.5 . . ?
C43 C44 H44B 109.5 . . ?
H44A C44 H44B 109.5 . . ?
C43 C44 H44C 109.5 . . ?
H44A C44 H44C 109.5 . . ?
H44B C44 H44C 109.5 . . ?
C46 C45 N5 117(3) . . ?
C46 C45 H45A 108.1 . . ?
N5 C45 H45A 108.1 . . ?
C46 C45 H45B 108.1 . . ?
N5 C45 H45B 108.1 . . ?
H45A C45 H45B 107.3 . . ?
C45 C46 H46A 109.5 . . ?
C45 C46 H46B 109.5 . . ?
H46A C46 H46B 109.5 . . ?
C45 C46 H46C 109.5 . . ?
H46A C46 H46C 109.5 . . ?
H46B C46 H46C 109.5 . . ?
N5 C47 C48 110(3) . . ?
N5 C47 H47A 109.6 . . ?
C48 C47 H47A 109.6 . . ?
N5 C47 H47B 109.6 . . ?
C48 C47 H47B 109.6 . . ?
H47A C47 H47B 108.1 . . ?
C47 C48 H48A 109.5 . . ?
C47 C48 H48B 109.5 . . ?
H48A C48 H48B 109.5 . . ?
C47 C48 H48C 109.5 . . ?
H48A C48 H48C 109.5 . . ?
H48B C48 H48C 109.5 . . ?
C50 C49 N5 105(3) . . ?
C50 C49 H49A 110.8 . . ?
N5 C49 H49A 110.8 . . ?
C50 C49 H49B 110.8 . . ?
N5 C49 H49B 110.8 . . ?
H49A C49 H49B 108.8 . . ?
C49 C50 H50A 109.5 . . ?
C49 C50 H50B 109.5 . . ?
H50A C50 H50B 109.5 . . ?
C49 C50 H50C 109.5 . . ?
H50A C50 H50C 109.5 . . ?
H50B C50 H50C 109.5 . . ?
C54 C53 O81 103(6) . . ?

```
C54 C53 H53A 111.2 . . ?
O81 C53 H53A 111.2 . . ?
C54 C53 H53B 111.2 . . ?
O81 C53 H53B 111.2 . . ?
H53A C53 H53B 109.1 . . ?
C53 C54 H54A 109.5 . . ?
C53 C54 H54B 109.5 . . ?
H54A C54 H54B 109.5 . . ?
C53 C54 H54C 109.5 . . ?
H54A C54 H54C 109.5 . . ?
H54B C54 H54C 109.5 . . ?
O81 C55 C56 122(6) . . ?
O81 C55 H55A 107.0 . . ?
C56 C55 H55A 107.0 . . ?
O81 C55 H55B 107.0 . . ?
C56 C55 H55B 107.0 . . ?
H55A C55 H55B 106.7 . . ?
C55 C56 H56A 109.5 . . ?
C55 C56 H56B 109.5 . . ?
H56A C56 H56B 109.5 . . ?
C55 C56 H56C 109.5 . . ?
H56A C56 H56C 109.5 . . ?
H56B C56 H56C 109.5 . . ?
C13 N1 C19 110(3) . . ?
C13 N1 C15 106(3) . . ?
C19 N1 C15 120(4) . . ?
C13 N1 C17 113(4) . . ?
C19 N1 C17 104(4) . . ?
C15 N1 C17 104(3) . . ?
C21 N2 C23 105(4) . . ?
C21 N2 C25 125(4) . . ?
C23 N2 C25 108(3) . . ?
C21 N2 C27 109(4) . . ?
C23 N2 C27 107(3) . . ?
C25 N2 C27 101(3) . . ?
C31 N3 C33 96(2) . . ?
C31 N3 C35 168(3) . . ?
C33 N3 C35 96(2) . . ?
C31 N3 C29 86(2) . . ?
C33 N3 C29 178(3) . . ?
C35 N3 C29 82(2) . . ?
C41 N4 C39 117(4) . . ?
C41 N4 C37 108(4) . . ?
C39 N4 C37 111(3) . . ?
C41 N4 C43 111(4) . . ?
C39 N4 C43 106(3) . . ?
C37 N4 C43 103(3) . . ?
C47 N5 C49 91(4) . . ?
C47 N5 C45 167(4) . . ?
C49 N5 C45 99(3) . . ?
C55 O81 C53 96(5) . . ?
P1 O2 W1 143(2) . . ?
W2 O3 W1 131.4(15) . . ?
P1 O4 W2 130.9(13) . . ?
W3 O6 W2 142.9(11) . . ?
W3 O8 W4 141.5(10) . . ?
P2 O10 W4 131.9(14) . . ?
W4 O11 W5 126(2) . . ?
P2 O12 W5 135.8(12) . . ?
W5 O14 W6 138(2) . . ?
W1 O16 W6 141.3(13) . . ?
Si1 O17 W1 126(2) . . ?
Si1 O18 W5 129(3) . . ?
Si1 O18 W4 118(2) . . ?
W5 O18 W4 104(2) . . ?
Si1 O19 W8 125.2(18) . . ?
```

```
Si1 O19 W3 125.0(18) . . ?
W8 O19 W3 92.8(12) . . ?
Si1 O19 W9 118.1(17) . . ?
W8 O19 W9 96.6(12) . . ?
W3 O19 W9 90.7(12) . . ?
Si1 O20 W7 128(2) . . ?
Si1 O20 W6 125(2) . . ?
W7 O20 W6 89.9(16) . . ?
Si1 O20 W10 119(2) . . ?
W7 O20 W10 93.9(17) . . ?
W6 O20 W10 91.7(16) . . ?
W7 O21 W1 146(2) . . ?
W8 O22 W2 158(2) . . ?
W8 O23 W3 118.9(19) . . ?
W9 O24 W3 122(2) . . ?
W9 O25 W4 156(3) . . ?
W5 O26 W10 131(2) . . ?
W10 O27 W6 111.2(16) . . ?
W7 O28 W6 115.7(11) . . ?
W8 O30 W7 162.6(16) . . ?
W9 O32 W8 138(3) . . ?
W9 O34 W10 162(3) . . ?
W10 O36 W7 123.9(19) . . ?
P3 O42 W11 130.6(13) . . ?
W11 O43 W12 108.8(9) . . ?
P3 O44 W12 127.7(14) . . ?
W13 O46 W12 140.4(18) . . ?
W14 O48 W13 149.1(16) . . ?
P4 O50 W14 135.0(16) . . ?
W15 O51 W14 111.5(9) . . ?
P4 O52 W15 133(2) . . ?
W16 O54 W15 145(3) . . ?
W16 O56 W11 135(2) . . ?
Si2 O57 W12 126.8(18) . . ?
Si2 O57 W11 130.9(18) . . ?
W12 O57 W11 95.9(14) . . ?
Si2 O58 W14 128.8(15) . . ?
Si2 O58 W15 127.5(14) . . ?
W14 O58 W15 90.4(8) . . ?
Si2 O59 W19 128.3(17) . . ?
Si2 O59 W18 126.3(16) . . ?
W19 O59 W18 89.3(9) . . ?
Si2 O59 W13 120.9(15) . . ?
W19 O59 W13 90.1(9) . . ?
W18 O59 W13 91.0(10) . . ?
Si2 O60 W20 128(2) . . ?
W11 O61 W17 142(2) . . ?
W12 O62 W18 133.7(15) . . ?
W13 O63 W18 116.4(16) . . ?
W13 O64 W19 119(3) . . ?
W14 O65 W19 139.5(18) . . ?
W15 O66 W20 148.1(14) . . ?
W16 O67 W20 125.3(14) . . ?
W17 O68 W16 110(2) . . ?
W17 O70 W18 156(2) . . ?
W18 O72 W19 117.0(13) . . ?
W20 O74 W19 160.0(16) . . ?
W17 O76 W20 116(2) . . ?
O17 Si1 O19 109(2) . . ?
O17 Si1 O20 108(2) . . ?
O19 Si1 O20 112(2) . . ?
O17 Si1 O18 111(2) . . ?
O19 Si1 O18 112(2) . . ?
O20 Si1 O18 104(2) . . ?
O58 Si2 O60 110.3(19) . . ?
O58 Si2 O59 109.6(17) . . ?
```

```
O60 Si2 O59 106.4(18) . . ?
O58 Si2 O57 120.3(18) . . ?
O60 Si2 O57 102.8(19) . . ?
O59 Si2 O57 106.3(18) . . ?
O4 P1 O2 111.0(15) . . ?
O4 P1 O37 108.6(13) . . ?
O2 P1 O37 115.8(14) . . ?
O4 P1 C1 128(3) . . ?
O2 P1 C1 99(3) . . ?
O37 P1 C1 94(2) . . ?
O38 P2 O12 106.9(16) . . ?
O38 P2 O10 120.4(16) . . ?
O12 P2 O10 110.2(11) . . ?
O38 P2 C4 111(2) . . ?
O12 P2 C4 104(3) . . ?
O10 P2 C4 103(3) . . ?
O77 P3 O42 110.7(18) . . ?
O77 P3 O44 114.5(18) . . ?
O42 P3 O44 111.0(14) . . ?
O77 P3 C7 119.3(17) . . ?
O42 P3 C7 107.9(11) . . ?
O44 P3 C7 92.0(10) . . ?
O52 P4 O78 119(2) . . ?
O52 P4 O50 110(2) . . ?
O78 P4 O50 106.0(19) . . ?
O52 P4 C10 103.7(16) . . ?
O78 P4 C10 101.1(18) . . ?
O50 P4 C10 117.4(15) . . ?
O16 W1 O1 103.6(9) . . ?
O16 W1 O2 103.5(9) . . ?
O1 W1 O2 98.8(11) . . ?
O16 W1 O21 85.0(14) . . ?
O1 W1 O21 94.2(12) . . ?
O2 W1 O21 162.2(13) . . ?
O16 W1 O3 157.7(9) . . ?
O1 W1 O3 98.2(10) . . ?
O2 W1 O3 76.8(12) . . ?
O21 W1 O3 89.4(12) . . ?
O16 W1 O17 88.4(12) . . ?
O1 W1 O17 167.6(10) . . ?
O2 W1 O17 80.7(10) . . ?
O21 W1 O17 84.0(15) . . ?
O3 W1 O17 69.6(9) . . ?
O5 W2 O3 108(2) . . ?
O5 W2 O6 104.6(19) . . ?
O3 W2 O6 145.1(10) . . ?
O5 W2 O22 110.7(18) . . ?
O3 W2 O22 95.3(12) . . ?
O6 W2 O22 84.5(11) . . ?
O5 W2 O4 97.9(19) . . ?
O3 W2 O4 81.7(11) . . ?
O6 W2 O4 81.7(8) . . ?
O22 W2 O4 150.5(12) . . ?
O7 W3 O6 106.7(11) . . ?
O7 W3 O8 100.3(10) . . ?
O6 W3 O8 91.4(8) . . ?
O7 W3 O23 101.1(11) . . ?
O6 W3 O23 88.6(11) . . ?
O8 W3 O23 157.6(11) . . ?
O7 W3 O24 100.5(11) . . ?
O6 W3 O24 152.6(12) . . ?
O8 W3 O24 86.0(12) . . ?
O23 W3 O24 83.7(16) . . ?
O7 W3 O19 172.3(9) . . ?
O6 W3 O19 78.7(9) . . ?
O8 W3 O19 84.8(9) . . ?
```

```
O23 W3 O19 73.2(13) . . ?
O24 W3 O19 73.9(14) . . ?
O11 W4 O9 98.1(14) . . ?
O11 W4 O25 98.0(15) . . ?
O9 W4 O25 102.4(15) . . ?
O11 W4 O10 83.4(14) . . ?
O9 W4 O10 89.1(11) . . ?
O25 W4 O10 168.0(15) . . ?
O11 W4 O8 155.8(13) . . ?
O9 W4 O8 105.8(9) . . ?
O25 W4 O8 80.5(14) . . ?
O10 W4 O8 93.2(8) . . ?
O11 W4 O18 64.4(13) . . ?
O9 W4 O18 160.5(13) . . ?
O25 W4 O18 89(2) . . ?
O10 W4 O18 80.9(14) . . ?
O8 W4 O18 91.5(13) . . ?
O13 W5 O14 96.1(17) . . ?
O13 W5 O26 102.4(19) . . ?
O14 W5 O26 99.1(18) . . ?
O13 W5 O11 107.2(13) . . ?
O14 W5 O11 156.5(13) . . ?
O26 W5 O11 79.6(14) . . ?
O13 W5 O18 168.3(19) . . ?
O14 W5 O18 91(2) . . ?
O26 W5 O18 85(2) . . ?
O11 W5 O18 65.4(15) . . ?
O13 W5 O12 95.9(12) . . ?
O14 W5 O12 85.8(12) . . ?
O26 W5 O12 160.3(15) . . ?
O11 W5 O12 88.3(13) . . ?
O18 W5 O12 75.3(16) . . ?
O15 W6 O28 105.3(11) . . ?
O15 W6 O16 101.8(11) . . ?
O28 W6 O16 87.4(9) . . ?
O15 W6 O14 90.4(14) . . ?
O28 W6 O14 163.1(13) . . ?
O16 W6 O14 95.7(13) . . ?
O15 W6 O27 95.2(13) . . ?
O28 W6 O27 90.6(11) . . ?
O16 W6 O27 162.8(11) . . ?
O14 W6 O27 81.5(14) . . ?
O15 W6 O20 173.7(15) . . ?
O28 W6 O20 75.6(12) . . ?
O16 W6 O20 84.5(13) . . ?
O14 W6 O20 88.1(15) . . ?
O27 W6 O20 78.5(14) . . ?
O15 W6 W7 136.8(10) . . ?
O28 W6 W7 31.7(6) . . ?
O16 W6 W7 85.2(7) . . ?
O14 W6 W7 131.8(11) . . ?
O27 W6 W7 84.3(9) . . ?
O20 W6 W7 43.8(11) . . ?
O29 W7 O28 102.9(16) . . ?
O29 W7 O21 111(2) . . ?
O28 W7 O21 80.5(15) . . ?
O29 W7 O36 94.3(19) . . ?
O28 W7 O36 93.5(12) . . ?
O21 W7 O36 154.4(17) . . ?
O29 W7 O30 97.6(17) . . ?
O28 W7 O30 159.1(11) . . ?
O21 W7 O30 88.5(16) . . ?
O36 W7 O30 88.9(14) . . ?
O29 W7 O20 168(2) . . ?
O28 W7 O20 78.9(14) . . ?
O21 W7 O20 80.8(18) . . ?
```

```
O36 W7 O20 73.6(16) . . ?
O30 W7 O20 81.9(15) . . ?
O29 W7 W6 134.5(15) . . ?
O28 W7 W6 32.6(6) . . ?
O21 W7 W6 77.9(13) . . ?
O36 W7 W6 83.7(11) . . ?
O30 W7 W6 127.6(9) . . ?
O20 W7 W6 46.3(12) . . ?
O31 W8 O22 116.3(17) . . ?
O31 W8 O30 106.9(13) . . ?
O22 W8 O30 93.1(16) . . ?
O31 W8 O23 98.9(15) . . ?
O22 W8 O23 79.8(17) . . ?
O30 W8 O23 153.6(15) . . ?
O31 W8 O32 103(2) . . ?
O22 W8 O32 140(2) . . ?
O30 W8 O32 81(2) . . ?
O23 W8 O32 89(2) . . ?
O31 W8 O19 164.3(13) . . ?
O22 W8 O19 77.3(16) . . ?
O30 W8 O19 78.9(13) . . ?
O23 W8 O19 74.8(14) . . ?
O32 W8 O19 62.8(18) . . ?
O33 W9 O34 105(2) . . ?
O33 W9 O25 113.8(19) . . ?
O34 W9 O25 97(2) . . ?
O33 W9 O32 102(2) . . ?
O34 W9 O32 80(3) . . ?
O25 W9 O32 143(2) . . ?
O33 W9 O24 101.5(17) . . ?
O34 W9 O24 153(2) . . ?
O25 W9 O24 79(2) . . ?
O32 W9 O24 88(2) . . ?
O33 W9 O19 161.6(14) . . ?
O34 W9 O19 80.0(19) . . ?
O25 W9 O19 82.8(17) . . ?
O32 W9 O19 60.4(19) . . ?
O24 W9 O19 73.1(14) . . ?
O35 W10 O36 99.4(16) . . ?
O35 W10 O27 88.5(16) . . ?
O36 W10 O27 90.8(15) . . ?
O35 W10 O34 113(2) . . ?
O36 W10 O34 89.0(19) . . ?
O27 W10 O34 158.2(19) . . ?
O35 W10 O26 102.9(18) . . ?
O36 W10 O26 157.1(17) . . ?
O27 W10 O26 84.6(17) . . ?
O34 W10 O26 87(2) . . ?
O35 W10 O20 161.5(17) . . ?
O36 W10 O20 67.8(15) . . ?
O27 W10 O20 78.6(15) . . ?
O34 W10 O20 81.1(19) . . ?
O26 W10 O20 89.3(16) . . ?
O41 W11 O61 107.7(17) . . ?
O41 W11 O43 102.8(13) . . ?
O61 W11 O43 92.4(13) . . ?
O41 W11 O57 161.5(15) . . ?
O61 W11 O57 90.7(15) . . ?
O43 W11 O57 77.3(11) . . ?
O41 W11 O42 85.8(13) . . ?
O61 W11 O42 164.7(13) . . ?
O43 W11 O42 91.7(8) . . ?
O57 W11 O42 75.8(10) . . ?
O41 W11 O56 96.2(16) . . ?
O61 W11 O56 96.0(17) . . ?
O43 W11 O56 155.8(13) . . ?
```

```
O57 W11 O56 79.9(15) . . ?
O42 W11 O56 74.7(13) . . ?
O41 W11 W12 134.8(12) . . ?
O61 W11 W12 95.1(12) . . ?
O43 W11 W12 36.2(6) . . ?
O57 W11 W12 41.3(9) . . ?
O42 W11 W12 79.6(6) . . ?
O56 W11 W12 120.1(12) . . ?
O62 W12 O44 176.9(12) . . ?
O62 W12 O45 89.2(11) . . ?
O44 W12 O45 90.9(10) . . ?
O62 W12 O43 84.9(10) . . ?
O44 W12 O43 92.0(10) . . ?
O45 W12 O43 93.3(9) . . ?
O62 W12 O57 89.5(13) . . ?
O44 W12 O57 89.9(11) . . ?
O45 W12 O57 170.9(12) . . ?
O43 W12 O57 77.6(11) . . ?
O62 W12 O46 92.4(13) . . ?
O44 W12 O46 90.7(12) . . ?
O45 W12 O46 97.7(12) . . ?
O43 W12 O46 168.6(11) . . ?
O57 W12 O46 91.3(13) . . ?
O62 W12 W11 89.2(9) . . ?
O44 W12 W11 88.3(8) . . ?
O45 W12 W11 128.2(8) . . ?
O43 W12 W11 35.0(6) . . ?
O57 W12 W11 42.8(9) . . ?
O46 W12 W11 134.1(10) . . ?
O47 W13 O64 101.1(18) . . ?
O47 W13 O46 100.5(14) . . ?
O64 W13 O46 157.8(18) . . ?
O47 W13 O63 97.4(13) . . ?
O64 W13 O63 85.1(17) . . ?
O46 W13 O63 87.2(14) . . ?
O47 W13 O48 106.0(12) . . ?
O64 W13 O48 82.8(17) . . ?
O46 W13 O48 96.0(13) . . ?
O63 W13 O48 155.3(12) . . ?
O47 W13 O59 172.4(11) . . ?
O64 W13 O59 73.7(17) . . ?
O46 W13 O59 84.3(12) . . ?
O63 W13 O59 76.8(12) . . ?
O48 W13 O59 79.1(10) . . ?
O49 W14 O48 95.7(13) . . ?
O49 W14 O65 99.2(13) . . ?
O48 W14 O65 88.8(14) . . ?
O49 W14 O50 99.5(12) . . ?
O48 W14 O50 89.0(12) . . ?
O65 W14 O50 161.2(12) . . ?
O49 W14 O51 99.4(11) . . ?
O48 W14 O51 164.9(11) . . ?
O65 W14 O51 89.8(11) . . ?
O50 W14 O51 87.5(9) . . ?
O49 W14 O58 174.5(12) . . ?
O48 W14 O58 86.3(11) . . ?
O65 W14 O58 86.0(11) . . ?
O50 W14 O58 75.3(9) . . ?
O51 W14 O58 78.6(8) . . ?
O53 W15 O66 100.0(16) . . ?
O53 W15 O51 95.6(15) . . ?
O66 W15 O51 96.8(10) . . ?
O53 W15 O54 104(2) . . ?
O66 W15 O54 84.6(16) . . ?
O51 W15 O54 159.5(15) . . ?
O53 W15 O52 92.1(17) . . ?
```

```
O66 W15 O52 167.9(11) . . ?
O51 W15 O52 81.5(10) . . ?
O54 W15 O52 92.9(16) . . ?
O53 W15 O58 173.8(15) . . ?
O66 W15 O58 84.6(9) . . ?
O51 W15 O58 79.6(8) . . ?
O54 W15 O58 80.2(14) . . ?
O52 W15 O58 83.3(10) . . ?
O55 W16 O54 117(2) . . ?
O55 W16 O67 110.0(19) . . ?
O54 W16 O67 96(2) . . ?
O55 W16 O56 98(2) . . ?
O54 W16 O56 83(2) . . ?
O67 W16 O56 148.4(17) . . ?
O55 W16 O68 91(2) . . ?
O54 W16 O68 152(2) . . ?
O67 W16 O68 70.7(17) . . ?
O56 W16 O68 96(2) . . ?
O69 W17 O70 102.6(16) . . ?
O69 W17 O76 104.2(18) . . ?
O70 W17 O76 98.6(18) . . ?
O69 W17 O61 96.4(15) . . ?
O70 W17 O61 83.7(16) . . ?
O76 W17 O61 158.2(17) . . ?
O69 W17 O68 90.4(19) . . ?
O70 W17 O68 165(2) . . ?
O76 W17 O68 85(2) . . ?
O61 W17 O68 87.8(19) . . ?
O72 W18 O70 103.6(13) . . ?
O72 W18 O71 107.5(15) . . ?
O70 W18 O71 92.4(18) . . ?
O72 W18 O63 90.8(11) . . ?
O70 W18 O63 157.3(14) . . ?
O71 W18 O63 100.0(17) . . ?
O72 W18 O62 163.2(10) . . ?
O70 W18 O62 80.2(13) . . ?
O71 W18 O62 88.5(15) . . ?
O63 W18 O62 81.2(11) . . ?
O72 W18 O59 76.4(10) . . ?
O70 W18 O59 90.5(12) . . ?
O71 W18 O59 174.4(16) . . ?
O63 W18 O59 75.8(11) . . ?
O62 W18 O59 87.3(10) . . ?
O72 W18 W19 33.0(7) . . ?
O70 W18 W19 103.7(11) . . ?
O71 W18 W19 139.7(14) . . ?
O63 W18 W19 78.9(9) . . ?
O62 W18 W19 130.3(7) . . ?
O59 W18 W19 43.7(7) . . ?
O73 W19 O64 99.1(17) . . ?
O73 W19 O72 107.7(12) . . ?
O64 W19 O72 93.4(15) . . ?
O73 W19 O74 99.3(12) . . ?
O64 W19 O74 155.7(17) . . ?
O72 W19 O74 95.9(11) . . ?
O73 W19 O65 92.9(13) . . ?
O64 W19 O65 78.5(16) . . ?
O72 W19 O65 158.8(11) . . ?
O74 W19 O65 84.8(12) . . ?
O73 W19 O59 174.3(12) . . ?
O64 W19 O59 76.8(16) . . ?
O72 W19 O59 76.7(10) . . ?
O74 W19 O59 83.7(10) . . ?
O65 W19 O59 82.4(11) . . ?
O73 W19 W18 136.9(10) . . ?
O64 W19 W18 82.2(14) . . ?
```

```
O72 W19 W18 30.0(7) . . ?
O74 W19 W18 94.9(9) . . ?
O65 W19 W18 128.9(9) . . ?
O59 W19 W18 47.0(7) . . ?
O75 W20 O74 90.5(16) . . ?
O75 W20 O66 98.2(14) . . ?
O74 W20 O66 88.3(12) . . ?
O75 W20 O67 110.5(15) . . ?
O74 W20 O67 158.2(12) . . ?
O66 W20 O67 83.3(11) . . ?
O75 W20 O76 102.8(17) . . ?
O74 W20 O76 92.9(15) . . ?
O66 W20 O76 159.0(14) . . ?
O67 W20 O76 88.0(15) . . ?
O75 W20 O60 174.8(16) . . ?
O74 W20 O60 84.4(12) . . ?
O66 W20 O60 80.6(11) . . ?
O67 W20 O60 74.4(12) . . ?
O76 W20 O60 78.6(15) . . ?

loop_
 _geom_torsion_atom_site_label_1
 _geom_torsion_atom_site_label_2
 _geom_torsion_atom_site_label_3
 _geom_torsion_atom_site_label_4
 _geom_torsion
 _geom_torsion_site_symmetry_1
 _geom_torsion_site_symmetry_2
 _geom_torsion_site_symmetry_3
 _geom_torsion_site_symmetry_4
 _geom_torsion_publ_flag
P2 C4 C5 C6 138(10) . . . . ?
C4 C5 C6 O40 -12(13) . . . . ?
C4 C5 C6 O39 -128(11) . . . . ?
P3 C7 C8 C9 115(3) . . . . ?
C7 C8 C9 O80 -159(4) . . . . ?
C7 C8 C9 O79 -19(6) . . . . ?
P4 C10 C11 C12 95(4) . . . . ?
C14 C13 N1 C19 -165(6) . . . . ?
C14 C13 N1 C15 64(6) . . . . ?
C14 C13 N1 C17 -50(7) . . . . ?
C20 C19 N1 C13 40(7) . . . . ?
C20 C19 N1 C15 163(6) . . . . ?
C20 C19 N1 C17 -81(6) . . . . ?
C16 C15 N1 C13 67(7) . . . . ?
C16 C15 N1 C19 -57(8) . . . . ?
C16 C15 N1 C17 -173(7) . . . . ?
C18 C17 N1 C13 -60(6) . . . . ?
C18 C17 N1 C19 59(6) . . . . ?
C18 C17 N1 C15 -175(5) . . . . ?
C22 C21 N2 C23 -61(11) . . . . ?
C22 C21 N2 C25 174(9) . . . . ?
C22 C21 N2 C27 54(11) . . . . ?
C24 C23 N2 C21 -87(6) . . . . ?
C24 C23 N2 C25 48(6) . . . . ?
C24 C23 N2 C27 156(6) . . . . ?
C26 C25 N2 C21 -64(6) . . . . ?
C26 C25 N2 C23 172(3) . . . . ?
C26 C25 N2 C27 60(4) . . . . ?
C28 C27 N2 C21 173(5) . . . . ?
C28 C27 N2 C23 -73(5) . . . . ?
C28 C27 N2 C25 40(5) . . . . ?
C32 C31 N3 C33 -59(4) . . . . ?
C32 C31 N3 C35 118(26) . . . . ?
C32 C31 N3 C29 120(3) . . . . ?
C34 C33 N3 C31 -86(4) . . . . ?
```

```
C34 C33 N3 C35 95(4) . . . . ?
C34 C33 N3 C29 133(98) . . . . ?
C36 C35 N3 C31 -71(28) . . . . ?
C36 C35 N3 C33 105(6) . . . . ?
C36 C35 N3 C29 -73(6) . . . . ?
C30 C29 N3 C31 114(3) . . . . ?
C30 C29 N3 C33 -104(99) . . . . ?
C30 C29 N3 C35 -66(4) . . . . ?
C42 C41 N4 C39 -69(5) . . . . ?
C42 C41 N4 C37 164(4) . . . . ?
C42 C41 N4 C43 52(5) . . . . ?
C40 C39 N4 C41 -85(6) . . . . ?
C40 C39 N4 C37 40(6) . . . . ?
C40 C39 N4 C43 152(6) . . . . ?
C38 C37 N4 C41 -72(5) . . . . ?
C38 C37 N4 C39 159(4) . . . . ?
C38 C37 N4 C43 46(5) . . . . ?
C44 C43 N4 C41 167(5) . . . . ?
C44 C43 N4 C39 -65(6) . . . . ?
C44 C43 N4 C37 51(6) . . . . ?
C48 C47 N5 C49 63(6) . . . . ?
C48 C47 N5 C45 -82(15) . . . . ?
C50 C49 N5 C47 99(5) . . . . ?
C50 C49 N5 C45 -89(5) . . . . ?
C46 C45 N5 C47 2(16) . . . . ?
C46 C45 N5 C49 -142(4) . . . . ?
C56 C55 O81 C53 -180(6) . . . . ?
C54 C53 O81 C55 171(6) . . . . ?
W1 O17 Si1 O19 -122(2) . . . . ?
W1 O17 Si1 O20 0(3) . . . . ?
W1 O17 Si1 O18 114(3) . . . . ?
W8 O19 Si1 O17 65(3) . . . . ?
W3 O19 Si1 O17 -60(3) . . . . ?
W9 O19 Si1 O17 -172.9(19) . . . . ?
W8 O19 Si1 O20 -55(3) . . . . ?
W3 O19 Si1 O20 -180(2) . . . . ?
W9 O19 Si1 O20 67(2) . . . . ?
W8 O19 Si1 O18 -172(2) . . . . ?
W3 O19 Si1 O18 64(3) . . . . ?
W9 O19 Si1 O18 -49(3) . . . . ?
W7 O20 Si1 O17 -65(3) . . . . ?
W6 O20 Si1 O17 58(3) . . . . ?
W10 O20 Si1 O17 173(2) . . . . ?
W7 O20 Si1 O19 55(3) . . . . ?
W6 O20 Si1 O19 179(2) . . . . ?
W10 O20 Si1 O19 -66(3) . . . . ?
W7 O20 Si1 O18 177(3) . . . . ?
W6 O20 Si1 O18 -60(3) . . . . ?
W10 O20 Si1 O18 55(3) . . . . ?
W5 O18 Si1 O17 -108(4) . . . . ?
W4 O18 Si1 O17 111(3) . . . . ?
W5 O18 Si1 O19 130(3) . . . . ?
W4 O18 Si1 O19 -12(3) . . . . ?
W5 O18 Si1 O20 9(4) . . . . ?
W4 O18 Si1 O20 -133(3) . . . . ?
W14 O58 Si2 O60 -124.1(19) . . . . ?
W15 O58 Si2 O60 5(3) . . . . ?
W14 O58 Si2 O59 -7(3) . . . . ?
W15 O58 Si2 O59 121.5(18) . . . . ?
W14 O58 Si2 O57 116(2) . . . . ?
W15 O58 Si2 O57 -115(2) . . . . ?
W20 O60 Si2 O58 58(3) . . . . ?
W20 O60 Si2 O59 -61(3) . . . . ?
W20 O60 Si2 O57 -173(2) . . . . ?
W19 O59 Si2 O58 -57(2) . . . . ?
W18 O59 Si2 O58 178.8(16) . . . . ?
```

```
W13 O59 Si2 O58 61(2) . . . . ?
W19 O59 Si2 O60 62(2) . . . . ?
W18 O59 Si2 O60 -62(2) . . . . ?
W13 O59 Si2 O60 -179.5(18) . . . . ?
W19 O59 Si2 O57 171.3(17) . . . . ?
W18 O59 Si2 O57 47(2) . . . . ?
W13 O59 Si2 O57 -70(2) . . . . ?
W12 O57 Si2 O58 -103(2) . . . . ?
W11 O57 Si2 O58 112(2) . . . . ?
W12 O57 Si2 O60 134(2) . . . . ?
W11 O57 Si2 O60 -11(3) . . . . ?
W12 O57 Si2 O59 22(3) . . . . ?
W11 O57 Si2 O59 -123(2) . . . . ?
W2 O4 P1 O2 -23(2) . . . . ?
W2 O4 P1 O37 -151.7(12) . . . . ?
W2 O4 P1 C1 97(4) . . . . ?
W1 O2 P1 O4 -6(4) . . . . ?
W1 O2 P1 O37 119(3) . . . . ?
W1 O2 P1 C1 -142(4) . . . . ?
C2 C1 P1 O4 -44(7) . . . . ?
C2 C1 P1 O2 81(6) . . . . ?
C2 C1 P1 O37 -162(6) . . . . ?
W5 O12 P2 O38 -132.2(15) . . . . ?
W5 O12 P2 O10 0(2) . . . . ?
W5 O12 P2 C4 110(3) . . . . ?
W4 O10 P2 O38 106.6(18) . . . . ?
W4 O10 P2 O12 -19(2) . . . . ?
W4 O10 P2 C4 -129(3) . . . . ?
C5 C4 P2 O38 -173(6) . . . . ?
C5 C4 P2 O12 -58(7) . . . . ?
C5 C4 P2 O10 57(8) . . . . ?
W11 O42 P3 O77 130(2) . . . . ?
W11 O42 P3 O44 2(2) . . . . ?
W11 O42 P3 C7 -97.8(15) . . . . ?
W12 O44 P3 O77 -111(2) . . . . ?
W12 O44 P3 O42 15(2) . . . . ?
W12 O44 P3 C7 125.2(15) . . . . ?
C8 C7 P3 O77 179(2) . . . . ?
C8 C7 P3 O42 52(3) . . . . ?
C8 C7 P3 O44 -61(2) . . . . ?
W15 O52 P4 O78 -123(3) . . . . ?
W15 O52 P4 O50 -1(3) . . . . ?
W15 O52 P4 C10 126(2) . . . . ?
W14 O50 P4 O52 22(3) . . . . ?
W14 O50 P4 O78 151(2) . . . . ?
W14 O50 P4 C10 -97(2) . . . . ?
C11 C10 P4 O52 -60(3) . . . . ?
C11 C10 P4 O78 177(2) . . . . ?
C11 C10 P4 O50 62(3) . . . . ?
W6 O16 W1 O1 -114(2) . . . . ?
W6 O16 W1 O2 143.0(19) . . . . ?
W6 O16 W1 O21 -21(2) . . . . ?
W6 O16 W1 O3 55(4) . . . . ?
W6 O16 W1 O17 63(2) . . . . ?
P1 O2 W1 O16 -116(3) . . . . ?
P1 O2 W1 O1 137(3) . . . . ?
P1 O2 W1 O21 0(6) . . . . ?
P1 O2 W1 O3 41(3) . . . . ?
P1 O2 W1 O17 -30(3) . . . . ?
W7 O21 W1 O16 27(4) . . . . ?
W7 O21 W1 O1 130(4) . . . . ?
W7 O21 W1 O2 -93(6) . . . . ?
W7 O21 W1 O3 -131(4) . . . . ?
W7 O21 W1 O17 -62(4) . . . . ?
W2 O3 W1 O16 9(4) . . . . ?
W2 O3 W1 O1 178.6(19) . . . . ?
```

```
W2 O3 W1 O2 -84(2) . . . . ?
W2 O3 W1 O21 84.4(19) . . . . ?
W2 O3 W1 O17 0.6(16) . . . . ?
Si1 O17 W1 O16 -45(3) . . . . ?
Si1 O17 W1 O1 122(4) . . . . ?
Si1 O17 W1 O2 -149(3) . . . . ?
Si1 O17 W1 O21 40(3) . . . . ?
Si1 O17 W1 O3 131(3) . . . . ?
W1 O3 W2 O5 165(2) . . . . ?
W1 O3 W2 O6 7(3) . . . . ?
W1 O3 W2 O22 -80.7(19) . . . . ?
W1 O3 W2 O4 69.8(19) . . . . ?
W3 O6 W2 O5 106(3) . . . . ?
W3 O6 W2 O3 -95(2) . . . . ?
W3 O6 W2 O22 -3.9(18) . . . . ?
W3 O6 W2 O4 -158(2) . . . . ?
W8 O22 W2 O5 -116(6) . . . . ?
W8 O22 W2 O3 132(6) . . . . ?
W8 O22 W2 O6 -12(6) . . . . ?
W8 O22 W2 O4 50(8) . . . . ?
P1 O4 W2 O5 -107(2) . . . . ?
P1 O4 W2 O3 -0.3(18) . . . . ?
P1 O4 W2 O6 148.8(18) . . . . ?
P1 O4 W2 O22 86(3) . . . . ?
W2 O6 W3 O7 -124(2) . . . . ?
W2 O6 W3 O8 135.0(19) . . . . ?
W2 O6 W3 O23 -22.5(18) . . . . ?
W2 O6 W3 O24 51(3) . . . . ?
W2 O6 W3 O19 50.6(17) . . . . ?
W4 O8 W3 O7 136.3(16) . . . . ?
W4 O8 W3 O6 -116.3(15) . . . . ?
W4 O8 W3 O23 -26(3) . . . . ?
W4 O8 W3 O24 36.4(14) . . . . ?
W4 O8 W3 O19 -37.8(14) . . . . ?
W8 O23 W3 O7 -179.5(16) . . . . ?
W8 O23 W3 O6 73.7(18) . . . . ?
W8 O23 W3 O8 -17(4) . . . . ?
W8 O23 W3 O24 -80(2) . . . . ?
W8 O23 W3 O19 -4.9(18) . . . . ?
W9 O24 W3 O7 -178(2) . . . . ?
W9 O24 W3 O6 7(5) . . . . ?
W9 O24 W3 O8 -78(2) . . . . ?
W9 O24 W3 O23 82(2) . . . . ?
W9 O24 W3 O19 8(2) . . . . ?
Si1 O19 W3 O7 -175(6) . . . . ?
W8 O19 W3 O7 47(7) . . . . ?
W9 O19 W3 O7 -49(7) . . . . ?
Si1 O19 W3 O6 49(2) . . . . ?
W8 O19 W3 O6 -88.4(9) . . . . ?
W9 O19 W3 O6 174.9(10) . . . . ?
Si1 O19 W3 O8 -43(2) . . . . ?
W8 O19 W3 O8 179.1(10) . . . . ?
W9 O19 W3 O8 82.4(8) . . . . ?
Si1 O19 W3 O23 141(2) . . . . ?
W8 O19 W3 O23 3.6(13) . . . . ?
W9 O19 W3 O23 -93.1(14) . . . . ?
Si1 O19 W3 O24 -131(3) . . . . ?
W8 O19 W3 O24 91.7(15) . . . . ?
W9 O19 W3 O24 -4.9(14) . . . . ?
W5 O11 W4 O9 -167(2) . . . . ?
W5 O11 W4 O25 89(2) . . . . ?
W5 O11 W4 O10 -79(2) . . . . ?
W5 O11 W4 O8 4(5) . . . . ?
W5 O11 W4 O18 3.9(17) . . . . ?
W9 O25 W4 O11 -114(7) . . . . ?
W9 O25 W4 O9 146(7) . . . . ?
```

```
W9 O25 W4 O10 -17(14) . . . . ?
W9 O25 W4 O8 42(7) . . . . ?
W9 O25 W4 O18 -50(7) . . . . ?
P2 O10 W4 O11 47(2) . . . . ?
P2 O10 W4 O9 145.7(19) . . . . ?
P2 O10 W4 O25 -50(7) . . . . ?
P2 O10 W4 O8 -108.5(18) . . . . ?
P2 O10 W4 O18 -17.5(16) . . . . ?
W3 O8 W4 O11 72(4) . . . . ?
W3 O8 W4 O9 -117.1(16) . . . . ?
W3 O8 W4 O25 -16.7(16) . . . . ?
W3 O8 W4 O10 153.0(16) . . . . ?
W3 O8 W4 O18 72.1(15) . . . . ?
Si1 O18 W4 O11 147(3) . . . . ?
W5 O18 W4 O11 -3.2(14) . . . . ?
Si1 O18 W4 O9 174(2) . . . . ?
W5 O18 W4 O9 24(6) . . . . ?
Si1 O18 W4 O25 47(3) . . . . ?
W5 O18 W4 O25 -103(2) . . . . ?
Si1 O18 W4 O10 -126(3) . . . . ?
W5 O18 W4 O10 83.8(19) . . . . ?
Si1 O18 W4 O8 -33(3) . . . . ?
W5 O18 W4 O8 176.9(19) . . . . ?
W6 O14 W5 O13 126(3) . . . . ?
W6 O14 W5 O26 23(3) . . . . ?
W6 O14 W5 O11 -62(5) . . . . ?
W6 O14 W5 O18 -63(3) . . . . ?
W6 O14 W5 O12 -138(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O13 -117(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O14 -19(4) . . . . ?
W10 O26 W5 O11 137(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O18 71(3) . . . . ?
W10 O26 W5 O12 84(5) . . . . ?
W4 O11 W5 O13 166(2) . . . . ?
W4 O11 W5 O14 -5(5) . . . . ?
W4 O11 W5 O26 -94(2) . . . . ?
W4 O11 W5 O18 -4.3(18) . . . . ?
W4 O11 W5 O12 70(2) . . . . ?
Si1 O18 W5 O13 165(8) . . . . ?
W4 O18 W5 O13 -50(11) . . . . ?
Si1 O18 W5 O14 37(4) . . . . ?
W4 O18 W5 O14 -177(2) . . . . ?
Si1 O18 W5 O26 -62(4) . . . . ?
W4 O18 W5 O26 84(2) . . . . ?
Si1 O18 W5 O11 -142(4) . . . . ?
W4 O18 W5 O11 2.9(12) . . . . ?
Si1 O18 W5 O12 123(4) . . . . ?
W4 O18 W5 O12 -92.0(19) . . . . ?
P2 O12 W5 O13 -123.1(18) . . . . ?
P2 O12 W5 O14 141.3(18) . . . . ?
P2 O12 W5 O26 36(4) . . . . ?
P2 O12 W5 O11 -16.0(19) . . . . ?
P2 O12 W5 O18 49.0(19) . . . . ?
W7 O28 W6 O15 173.6(12) . . . . ?
W7 O28 W6 O16 -84.9(12) . . . . ?
W7 O28 W6 O14 16(5) . . . . ?
W7 O28 W6 O27 78.0(13) . . . . ?
W7 O28 W6 O20 0.0(15) . . . . ?
W1 O16 W6 O15 152(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O28 47(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O14 -116(2) . . . . ?
W1 O16 W6 O27 -37(5) . . . . ?
W1 O16 W6 O20 -29(2) . . . . ?
W1 O16 W6 W7 15(2) . . . . ?
W5 O14 W6 O15 -143(3) . . . . ?
W5 O14 W6 O28 15(7) . . . . ?
```

```
W5 O14 W6 O16 115(3) . . . . ?
W5 O14 W6 O27 -48(3) . . . . ?
W5 O14 W6 O20 31(3) . . . . ?
W5 O14 W6 W7 27(4) . . . . ?
W10 O27 W6 O15 179.1(16) . . . . ?
W10 O27 W6 O28 -75.5(15) . . . . ?
W10 O27 W6 O16 8(5) . . . . ?
W10 O27 W6 O14 89.5(17) . . . . ?
W10 O27 W6 O20 -0.3(17) . . . . ?
W10 O27 W6 W7 -44.3(14) . . . . ?
Si1 O20 W6 O15 122(13) . . . . ?
W7 O20 W6 O15 -99(13) . . . . ?
W10 O20 W6 O15 -5(14) . . . . ?
Si1 O20 W6 O28 -139(3) . . . . ?
W7 O20 W6 O28 0.0(11) . . . . ?
W10 O20 W6 O28 93.9(13) . . . . ?
Si1 O20 W6 O16 -50(3) . . . . ?
W7 O20 W6 O16 88.7(14) . . . . ?
W10 O20 W6 O16 -177.3(13) . . . . ?
Si1 O20 W6 O14 46(3) . . . . ?
W7 O20 W6 O14 -175.4(16) . . . . ?
W10 O20 W6 O14 -81.5(15) . . . . ?
Si1 O20 W6 O27 128(3) . . . . ?
W7 O20 W6 O27 -93.7(15) . . . . ?
W10 O20 W6 O27 0.2(12) . . . . ?
Si1 O20 W6 W7 -139(3) . . . . ?
W10 O20 W6 W7 93.9(17) . . . . ?
W6 O28 W7 O29 -167.8(18) . . . . ?
W6 O28 W7 O21 82.4(16) . . . . ?
W6 O28 W7 O36 -72.6(15) . . . . ?
W6 O28 W7 O30 23(4) . . . . ?
W6 O28 W7 O20 0.0(15) . . . . ?
W1 O21 W7 O29 -153(4) . . . . ?
W1 O21 W7 O28 -53(4) . . . . ?
W1 O21 W7 O36 25(7) . . . . ?
W1 O21 W7 O30 109(4) . . . . ?
W1 O21 W7 O20 27(4) . . . . ?
W1 O21 W7 W6 -20(4) . . . . ?
W10 O36 W7 O29 172(2) . . . . ?
W10 O36 W7 O28 69(2) . . . . ?
W10 O36 W7 O21 -6(5) . . . . ?
W10 O36 W7 O30 -90(2) . . . . ?
W10 O36 W7 O20 -9(2) . . . . ?
W10 O36 W7 W6 37.6(19) . . . . ?
W8 O30 W7 O29 -132(6) . . . . ?
W8 O30 W7 O28 37(9) . . . . ?
W8 O30 W7 O21 -21(6) . . . . ?
W8 O30 W7 O36 134(6) . . . . ?
W8 O30 W7 O20 60(6) . . . . ?
W8 O30 W7 W6 53(7) . . . . ?
Si1 O20 W7 O29 -124(9) . . . . ?
W6 O20 W7 O29 100(9) . . . . ?
W10 O20 W7 O29 8(10) . . . . ?
Si1 O20 W7 O28 137(3) . . . . ?
W6 O20 W7 O28 0.0(11) . . . . ?
W10 O20 W7 O28 -91.7(13) . . . . ?
Si1 O20 W7 O21 55(3) . . . . ?
W6 O20 W7 O21 -82.0(18) . . . . ?
W10 O20 W7 O21 -173.7(19) . . . . ?
Si1 O20 W7 O36 -126(3) . . . . ?
W6 O20 W7 O36 97.1(16) . . . . ?
W10 O20 W7 O36 5.4(13) . . . . ?
Si1 O20 W7 O30 -35(3) . . . . ?
W6 O20 W7 O30 -171.7(16) . . . . ?
W10 O20 W7 O30 96.6(14) . . . . ?
Si1 O20 W7 W6 137(4) . . . . ?
```

```
W10 O20 W7 W6 -91.7(17) . . . . ?
O15 W6 W7 O29 8(3) . . . . ?
O28 W6 W7 O29 17(2) . . . . ?
O16 W6 W7 O29 110(2) . . . . ?
O14 W6 W7 O29 -157(3) . . . . ?
O27 W6 W7 O29 -84(2) . . . . ?
O20 W6 W7 O29 -163(3) . . . . ?
O15 W6 W7 O28 -9.1(18) . . . . ?
O16 W6 W7 O28 93.0(13) . . . . ?
O14 W6 W7 O28 -173.7(19) . . . . ?
O27 W6 W7 O28 -100.5(15) . . . . ?
O20 W6 W7 O28 -180(2) . . . . ?
O15 W6 W7 O21 -100.3(19) . . . . ?
O28 W6 W7 O21 -91.2(18) . . . . ?
O16 W6 W7 O21 1.8(15) . . . . ?
O14 W6 W7 O21 95(2) . . . . ?
O27 W6 W7 O21 168.2(16) . . . . ?
O20 W6 W7 O21 89(2) . . . . ?
O15 W6 W7 O36 97.6(17) . . . . ?
O28 W6 W7 O36 106.7(16) . . . . ?
O16 W6 W7 O36 -160.4(12) . . . . ?
O14 W6 W7 O36 -67.1(18) . . . . ?
O27 W6 W7 O36 6.1(14) . . . . ?
O20 W6 W7 O36 -73.3(19) . . . . ?
O15 W6 W7 O30 -178.8(17) . . . . ?
O28 W6 W7 O30 -169.7(17) . . . . ?
O16 W6 W7 O30 -76.7(14) . . . . ?
O14 W6 W7 O30 17(2) . . . . ?
O27 W6 W7 O30 89.8(15) . . . . ?
O20 W6 W7 O30 10(2) . . . . ?
O15 W6 W7 O20 171(2) . . . . ?
O28 W6 W7 O20 180(2) . . . . ?
O16 W6 W7 O20 -87.1(18) . . . . ?
O14 W6 W7 O20 6(2) . . . . ?
O27 W6 W7 O20 79.4(19) . . . . ?
W2 O22 W8 O31 140(6) . . . . ?
W2 O22 W8 O30 -109(6) . . . . ?
W2 O22 W8 O23 45(6) . . . . ?
W2 O22 W8 O32 -30(8) . . . . ?
W2 O22 W8 O19 -31(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O31 135(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O22 16(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O23 -57(8) . . . . ?
W7 O30 W8 O32 -124(6) . . . . ?
W7 O30 W8 O19 -60(6) . . . . ?
W3 O23 W8 O31 170(2) . . . . ?
W3 O23 W8 O22 -75(2) . . . . ?
W3 O23 W8 O30 1(5) . . . . ?
W3 O23 W8 O32 67(2) . . . . ?
W3 O23 W8 O19 4.9(17) . . . . ?
W9 O32 W8 O31 -155(5) . . . . ?
W9 O32 W8 O22 16(8) . . . . ?
W9 O32 W8 O30 100(6) . . . . ?
W9 O32 W8 O23 -56(6) . . . . ?
W9 O32 W8 O19 18(5) . . . . ?
Si1 O19 W8 O31 151(4) . . . . ?
W3 O19 W8 O31 -72(5) . . . . ?
W9 O19 W8 O31 19(5) . . . . ?
Si1 O19 W8 O22 -59(2) . . . . ?
W3 O19 W8 O22 79.0(16) . . . . ?
W9 O19 W8 O22 170.0(17) . . . . ?
Si1 O19 W8 O30 37(2) . . . . ?
W3 O19 W8 O30 174.7(14) . . . . ?
W9 O19 W8 O30 -94.2(13) . . . . ?
Si1 O19 W8 O23 -141(2) . . . . ?
W3 O19 W8 O23 -3.7(13) . . . . ?
```

```
W9 O19 W8 O23 87.4(15) . . . . ?
Si1 O19 W8 O32 122(3) . . . . ?
W3 O19 W8 O32 -100(3) . . . . ?
W9 O19 W8 O32 -9(2) . . . . ?
W10 O34 W9 O33 -122(10) . . . . ?
W10 O34 W9 O25 -5(11) . . . . ?
W10 O34 W9 O32 138(11) . . . . ?
W10 O34 W9 O24 73(12) . . . . ?
W10 O34 W9 O19 77(10) . . . . ?
W4 O25 W9 O33 -167(7) . . . . ?
W4 O25 W9 O34 84(7) . . . . ?
W4 O25 W9 O32 2(10) . . . . ?
W4 O25 W9 O24 -69(7) . . . . ?
W4 O25 W9 O19 5(7) . . . . ?
W8 O32 W9 O33 156(5) . . . . ?
W8 O32 W9 O34 -101(6) . . . . ?
W8 O32 W9 O25 -13(9) . . . . ?
W8 O32 W9 O24 55(6) . . . . ?
W8 O32 W9 O19 -17(4) . . . . ?
W3 O24 W9 O33 -169(2) . . . . ?
W3 O24 W9 O34 -4(6) . . . . ?
W3 O24 W9 O25 79(3) . . . . ?
W3 O24 W9 O32 -67(3) . . . . ?
W3 O24 W9 O19 -7(2) . . . . ?
Si1 O19 W9 O33 -148(4) . . . . ?
W8 O19 W9 O33 -12(5) . . . . ?
W3 O19 W9 O33 81(4) . . . . ?
Si1 O19 W9 O34 -42(2) . . . . ?
W8 O19 W9 O34 94(2) . . . . ?
W3 O19 W9 O34 -173(2) . . . . ?
Si1 O19 W9 O25 56(2) . . . . ?
W8 O19 W9 O25 -167.9(19) . . . . ?
W3 O19 W9 O25 -75.0(17) . . . . ?
Si1 O19 W9 O32 -126(3) . . . . ?
W8 O19 W9 O32 10(3) . . . . ?
W3 O19 W9 O32 102(3) . . . . ?
Si1 O19 W9 O24 137(2) . . . . ?
W8 O19 W9 O24 -87.5(17) . . . . ?
W3 O19 W9 O24 5.4(15) . . . . ?
W7 O36 W10 O35 -158(2) . . . . ?
W7 O36 W10 O27 -70(2) . . . . ?
W7 O36 W10 O34 89(3) . . . . ?
W7 O36 W10 O26 8(6) . . . . ?
W7 O36 W10 O20 7.7(19) . . . . ?
W6 O27 W10 O35 166.9(18) . . . . ?
W6 O27 W10 O36 67.5(17) . . . . ?
W6 O27 W10 O34 -22(6) . . . . ?
W6 O27 W10 O26 -90.0(18) . . . . ?
W6 O27 W10 O20 0.3(16) . . . . ?
W9 O34 W10 O35 116(10) . . . . ?
W9 O34 W10 O36 -144(10) . . . . ?
W9 O34 W10 O27 -55(13) . . . . ?
W9 O34 W10 O26 13(10) . . . . ?
W9 O34 W10 O20 -76(10) . . . . ?
W5 O26 W10 O35 136(3) . . . . ?
W5 O26 W10 O36 -31(7) . . . . ?
W5 O26 W10 O27 49(3) . . . . ?
W5 O26 W10 O34 -111(4) . . . . ?
W5 O26 W10 O20 -30(3) . . . . ?
Si1 O20 W10 O35 -179(4) . . . . ?
W7 O20 W10 O35 43(6) . . . . ?
W6 O20 W10 O35 -47(6) . . . . ?
Si1 O20 W10 O36 132(3) . . . . ?
W7 O20 W10 O36 -5.8(14) . . . . ?
W6 O20 W10 O36 -95.8(17) . . . . ?
Si1 O20 W10 O27 -132(3) . . . . ?
```

```
W7 O20 W10 O27 89.7(16) . . . . ?
W6 O20 W10 O27 -0.3(14) . . . . ?
Si1 O20 W10 O34 40(3) . . . . ?
W7 O20 W10 O34 -98(2) . . . . ?
W6 O20 W10 O34 172(2) . . . . ?
Si1 O20 W10 O26 -48(3) . . . . ?
W7 O20 W10 O26 174.4(18) . . . . ?
W6 O20 W10 O26 84.4(18) . . . . ?
W17 O61 W11 O41 125(3) . . . . ?
W17 O61 W11 O43 -130(3) . . . . ?
W17 O61 W11 O57 -53(3) . . . . ?
W17 O61 W11 O42 -25(8) . . . . ?
W17 O61 W11 O56 27(3) . . . . ?
W17 O61 W11 W12 -94(3) . . . . ?
W12 O43 W11 O41 -155.9(14) . . . . ?
W12 O43 W11 O61 95.4(14) . . . . ?
W12 O43 W11 O57 5.2(11) . . . . ?
W12 O43 W11 O42 -69.8(10) . . . . ?
W12 O43 W11 O56 -15(4) . . . . ?
Si2 O57 W11 O41 -120(5) . . . . ?
W12 O57 W11 O41 88(5) . . . . ?
Si2 O57 W11 O61 55(3) . . . . ?
W12 O57 W11 O61 -96.9(16) . . . . ?
Si2 O57 W11 O43 148(2) . . . . ?
W12 O57 W11 O43 -4.7(10) . . . . ?
Si2 O57 W11 O42 -117(2) . . . . ?
W12 O57 W11 O42 90.4(12) . . . . ?
Si2 O57 W11 O56 -41(2) . . . . ?
W12 O57 W11 O56 167.0(17) . . . . ?
Si2 O57 W11 W12 152(3) . . . . ?
P3 O42 W11 O41 128(2) . . . . ?
P3 O42 W11 O61 -80(5) . . . . ?
P3 O42 W11 O43 25.2(17) . . . . ?
P3 O42 W11 O57 -51.3(18) . . . . ?
P3 O42 W11 O56 -135(2) . . . . ?
P3 O42 W11 W12 -9.2(15) . . . . ?
W16 O56 W11 O41 -111(3) . . . . ?
W16 O56 W11 O61 -2(4) . . . . ?
W16 O56 W11 O43 107(4) . . . . ?
W16 O56 W11 O57 87(3) . . . . ?
W16 O56 W11 O42 165(4) . . . . ?
W16 O56 W11 W12 97(3) . . . . ?
W18 O62 W12 O44 135(21) . . . . ?
W18 O62 W12 O45 -132.7(18) . . . . ?
W18 O62 W12 O43 133.9(18) . . . . ?
W18 O62 W12 O57 56.3(19) . . . . ?
W18 O62 W12 O46 -35(2) . . . . ?
W18 O62 W12 W11 99.1(17) . . . . ?
P3 O44 W12 O62 -54(23) . . . . ?
P3 O44 W12 O45 -145.5(17) . . . . ?
P3 O44 W12 O43 -52.2(18) . . . . ?
P3 O44 W12 O57 25.4(19) . . . . ?
P3 O44 W12 O46 116.7(18) . . . . ?
P3 O44 W12 W11 -17.4(17) . . . . ?
W11 O43 W12 O62 -96.0(12) . . . . ?
W11 O43 W12 O44 84.1(11) . . . . ?
W11 O43 W12 O45 175.2(10) . . . . ?
W11 O43 W12 O57 -5.4(12) . . . . ?
W11 O43 W12 O46 -19(6) . . . . ?
Si2 O57 W12 O62 -65(2) . . . . ?
W11 O57 W12 O62 89.4(13) . . . . ?
Si2 O57 W12 O44 118(2) . . . . ?
W11 O57 W12 O44 -87.5(12) . . . . ?
Si2 O57 W12 O45 -146(6) . . . . ?
W11 O57 W12 O45 8(8) . . . . ?
Si2 O57 W12 O43 -149(2) . . . . ?
```

```
W11 O57 W12 O43 4.5(10) . . . . ?
Si2 O57 W12 O46 28(2) . . . . ?
W11 O57 W12 O46 -178.2(13) . . . . ?
Si2 O57 W12 W11 -154(3) . . . . ?
W13 O46 W12 O62 26(3) . . . . ?
W13 O46 W12 O44 -154(3) . . . . ?
W13 O46 W12 O45 115(3) . . . . ?
W13 O46 W12 O43 -50(7) . . . . ?
W13 O46 W12 O57 -64(3) . . . . ?
W13 O46 W12 W11 -65(3) . . . . ?
O41 W11 W12 O62 116.4(19) . . . . ?
O61 W11 W12 O62 -4.8(15) . . . . ?
O43 W11 W12 O62 82.2(13) . . . . ?
O57 W11 W12 O62 -90.1(16) . . . . ?
O42 W11 W12 O62 -170.3(11) . . . . ?
O56 W11 W12 O62 -104.8(16) . . . . ?
O41 W11 W12 O44 -61.7(18) . . . . ?
O61 W11 W12 O44 177.0(14) . . . . ?
O43 W11 W12 O44 -95.9(12) . . . . ?
O57 W11 W12 O44 91.8(15) . . . . ?
O42 W11 W12 O44 11.6(9) . . . . ?
O56 W11 W12 O44 77.0(15) . . . . ?
O41 W11 W12 O45 28.1(19) . . . . ?
O61 W11 W12 O45 -93.2(15) . . . . ?
O43 W11 W12 O45 -6.1(13) . . . . ?
O57 W11 W12 O45 -178.4(17) . . . . ?
O42 W11 W12 O45 101.4(11) . . . . ?
O56 W11 W12 O45 166.8(16) . . . . ?
O41 W11 W12 O43 34.2(19) . . . . ?
O61 W11 W12 O43 -87.0(16) . . . . ?
O57 W11 W12 O43 -172.3(17) . . . . ?
O42 W11 W12 O43 107.5(11) . . . . ?
O56 W11 W12 O43 172.9(17) . . . . ?
O41 W11 W12 O57 -154(2) . . . . ?
O61 W11 W12 O57 85.3(18) . . . . ?
O43 W11 W12 O57 172.3(17) . . . . ?
O42 W11 W12 O57 -80.2(14) . . . . ?
O56 W11 W12 O57 -14.8(19) . . . . ?
O41 W11 W12 O46 -151(2) . . . . ?
O61 W11 W12 O46 87.8(18) . . . . ?
O43 W11 W12 O46 174.8(17) . . . . ?
O57 W11 W12 O46 2.5(18) . . . . ?
O42 W11 W12 O46 -77.7(14) . . . . ?
O56 W11 W12 O46 -12.2(19) . . . . ?
W19 O64 W13 O47 173(2) . . . . ?
W19 O64 W13 O46 7(7) . . . . ?
W19 O64 W13 O63 77(3) . . . . ?
W19 O64 W13 O48 -82(3) . . . . ?
W19 O64 W13 O59 -1(2) . . . . ?
W12 O46 W13 O47 -142(3) . . . . ?
W12 O46 W13 O64 25(6) . . . . ?
W12 O46 W13 O63 -45(3) . . . . ?
W12 O46 W13 O48 111(3) . . . . ?
W12 O46 W13 O59 32(3) . . . . ?
W18 O63 W13 O47 -176.7(16) . . . . ?
W18 O63 W13 O64 -76(2) . . . . ?
W18 O63 W13 O46 83.0(18) . . . . ?
W18 O63 W13 O48 -15(4) . . . . ?
W18 O63 W13 O59 -1.8(14) . . . . ?
W14 O48 W13 O47 142(3) . . . . ?
W14 O48 W13 O64 43(3) . . . . ?
W14 O48 W13 O46 -115(3) . . . . ?
W14 O48 W13 O63 -18(5) . . . . ?
W14 O48 W13 O59 -32(3) . . . . ?
Si2 O59 W13 O47 177(8) . . . . ?
W19 O59 W13 O47 -47(9) . . . . ?
```

```
W18 O59 W13 O47 42(9) . . . . ?
Si2 O59 W13 O64 -136(2) . . . . ?
W19 O59 W13 O64 0.8(16) . . . . ?
W18 O59 W13 O64 90.1(17) . . . . ?
Si2 O59 W13 O46 47(2) . . . . ?
W19 O59 W13 O46 -176.3(13) . . . . ?
W18 O59 W13 O46 -87.1(12) . . . . ?
Si2 O59 W13 O63 136(2) . . . . ?
W19 O59 W13 O63 -87.9(12) . . . . ?
W18 O59 W13 O63 1.4(11) . . . . ?
Si2 O59 W13 O48 -49.9(19) . . . . ?
W19 O59 W13 O48 86.4(11) . . . . ?
W18 O59 W13 O48 175.7(11) . . . . ?
W13 O48 W14 O49 -120(3) . . . . ?
W13 O48 W14 O65 -21(3) . . . . ?
W13 O48 W14 O50 140(3) . . . . ?
W13 O48 W14 O51 64(6) . . . . ?
W13 O48 W14 O58 65(3) . . . . ?
W19 O65 W14 O49 124(2) . . . . ?
W19 O65 W14 O48 28(3) . . . . ?
W19 O65 W14 O50 -55(5) . . . . ?
W19 O65 W14 O51 -137(2) . . . . ?
W19 O65 W14 O58 -58(2) . . . . ?
P4 O50 W14 O49 109(2) . . . . ?
P4 O50 W14 O48 -155(2) . . . . ?
P4 O50 W14 O65 -72(5) . . . . ?
P4 O50 W14 O51 10(2) . . . . ?
P4 O50 W14 O58 -69(2) . . . . ?
W15 O51 W14 O49 -173.0(12) . . . . ?
W15 O51 W14 O48 3(5) . . . . ?
W15 O51 W14 O65 87.7(12) . . . . ?
W15 O51 W14 O50 -73.7(11) . . . . ?
W15 O51 W14 O58 1.7(9) . . . . ?
Si2 O58 W14 O49 -150(11) . . . . ?
W15 O58 W14 O49 68(12) . . . . ?
Si2 O58 W14 O48 -39(2) . . . . ?
W15 O58 W14 O48 179.0(11) . . . . ?
Si2 O58 W14 O65 50(2) . . . . ?
W15 O58 W14 O65 -92.0(12) . . . . ?
Si2 O58 W14 O50 -129(2) . . . . ?
W15 O58 W14 O50 89.1(9) . . . . ?
Si2 O58 W14 O51 140.4(19) . . . . ?
W15 O58 W14 O51 -1.3(7) . . . . ?
W20 O66 W15 O53 -131(3) . . . . ?
W20 O66 W15 O51 132(2) . . . . ?
W20 O66 W15 O54 -27(3) . . . . ?
W20 O66 W15 O52 51(7) . . . . ?
W20 O66 W15 O58 53(3) . . . . ?
W14 O51 W15 O53 174.3(16) . . . . ?
W14 O51 W15 O66 -84.9(11) . . . . ?
W14 O51 W15 O54 8(4) . . . . ?
W14 O51 W15 O52 83.0(11) . . . . ?
W14 O51 W15 O58 -1.7(9) . . . . ?
W16 O54 W15 O53 97(5) . . . . ?
W16 O54 W15 O66 -2(5) . . . . ?
W16 O54 W15 O51 -97(6) . . . . ?
W16 O54 W15 O52 -170(5) . . . . ?
W16 O54 W15 O58 -87(5) . . . . ?
P4 O52 W15 O53 -140(3) . . . . ?
P4 O52 W15 O66 38(7) . . . . ?
P4 O52 W15 O51 -45(2) . . . . ?
P4 O52 W15 O54 115(3) . . . . ?
P4 O52 W15 O58 36(2) . . . . ?
Si2 O58 W15 O53 179(100) . . . . ?
W14 O58 W15 O53 -39(15) . . . . ?
Si2 O58 W15 O66 -43.2(19) . . . . ?
```

```
W14 O58 W15 O66 99.3(10) . . . . ?
Si2 O58 W15 O51 -141.1(18) . . . . ?
W14 O58 W15 O51 1.4(7) . . . . ?
Si2 O58 W15 O54 42(2) . . . . ?
W14 O58 W15 O54 -175.3(15) . . . . ?
Si2 O58 W15 O52 136.3(19) . . . . ?
W14 O58 W15 O52 -81.2(10) . . . . ?
W15 O54 W16 O55 -131(5) . . . . ?
W15 O54 W16 O67 -16(5) . . . . ?
W15 O54 W16 O56 133(5) . . . . ?
W15 O54 W16 O68 43(8) . . . . ?
W20 O67 W16 O55 -176(2) . . . . ?
W20 O67 W16 O54 62(2) . . . . ?
W20 O67 W16 O56 -24(4) . . . . ?
W20 O67 W16 O68 -92(2) . . . . ?
W11 O56 W16 O55 115(3) . . . . ?
W11 O56 W16 O54 -129(4) . . . . ?
W11 O56 W16 O67 -40(5) . . . . ?
W11 O56 W16 O68 23(4) . . . . ?
W17 O68 W16 O55 -165(3) . . . . ?
W17 O68 W16 O54 20(6) . . . . ?
W17 O68 W16 O67 84(2) . . . . ?
W17 O68 W16 O56 -67(3) . . . . ?
W18 O70 W17 O69 168(5) . . . . ?
W18 O70 W17 O76 62(6) . . . . ?
W18 O70 W17 O61 -97(6) . . . . ?
W18 O70 W17 O68 -41(12) . . . . ?
W20 O76 W17 O69 163(2) . . . . ?
W20 O76 W17 O70 -92(2) . . . . ?
W20 O76 W17 O61 3(6) . . . . ?
W20 O76 W17 O68 73(3) . . . . ?
W11 O61 W17 O69 -155(3) . . . . ?
W11 O61 W17 O70 103(3) . . . . ?
W11 O61 W17 O76 6(7) . . . . ?
W11 O61 W17 O68 -65(4) . . . . ?
W16 O68 W17 O69 171(2) . . . . ?
W16 O68 W17 O70 19(9) . . . . ?
W16 O68 W17 O76 -85(2) . . . . ?
W16 O68 W17 O61 75(2) . . . . ?
W19 O72 W18 O70 94.3(16) . . . . ?
W19 O72 W18 O71 -168.7(17) . . . . ?
W19 O72 W18 O63 -68.0(15) . . . . ?
W19 O72 W18 O62 -7(4) . . . . ?
W19 O72 W18 O59 7.1(11) . . . . ?
W17 O70 W18 O72 -64(6) . . . . ?
W17 O70 W18 O71 -173(6) . . . . ?
W17 O70 W18 O63 64(7) . . . . ?
W17 O70 W18 O62 99(6) . . . . ?
W17 O70 W18 O59 12(6) . . . . ?
W17 O70 W18 W19 -30(6) . . . . ?
W13 O63 W18 O72 77.5(17) . . . . ?
W13 O63 W18 O70 -53(4) . . . . ?
W13 O63 W18 O71 -174.5(19) . . . . ?
W13 O63 W18 O62 -87.6(16) . . . . ?
W13 O63 W18 O59 1.8(14) . . . . ?
W13 O63 W18 W19 46.5(14) . . . . ?
W12 O62 W18 O72 -2(5) . . . . ?
W12 O62 W18 O70 -107(2) . . . . ?
W12 O62 W18 O71 160(2) . . . . ?
W12 O62 W18 O63 59.8(19) . . . . ?
W12 O62 W18 O59 -16.2(18) . . . . ?
W12 O62 W18 W19 -7(2) . . . . ?
Si2 O59 W18 O72 134(2) . . . . ?
W19 O59 W18 O72 -5.6(9) . . . . ?
W13 O59 W18 O72 -95.7(10) . . . . ?
Si2 O59 W18 O70 30(2) . . . . ?
```

```
W19 O59 W18 O70 -109.5(13) . . . . ?
W13 O59 W18 O70 160.4(13) . . . . ?
Si2 O59 W18 O71 -91(16) . . . . ?
W19 O59 W18 O71 129(16) . . . . ?
W13 O59 W18 O71 39(16) . . . . ?
Si2 O59 W18 O63 -132(2) . . . . ?
W19 O59 W18 O63 88.8(11) . . . . ?
W13 O59 W18 O63 -1.3(10) . . . . ?
Si2 O59 W18 O62 -50.2(19) . . . . ?
W19 O59 W18 O62 170.3(10) . . . . ?
W13 O59 W18 O62 80.3(9) . . . . ?
Si2 O59 W18 W19 139(2) . . . . ?
W13 O59 W18 W19 -90.1(9) . . . . ?
W13 O64 W19 O73 177(2) . . . . ?
W13 O64 W19 O72 -74(3) . . . . ?
W13 O64 W19 O74 38(6) . . . . ?
W13 O64 W19 O65 86(3) . . . . ?
W13 O64 W19 O59 1(2) . . . . ?
W13 O64 W19 W18 -46(2) . . . . ?
W18 O72 W19 O73 168.6(13) . . . . ?
W18 O72 W19 O64 68.0(19) . . . . ?
W18 O72 W19 O74 -89.6(14) . . . . ?
W18 O72 W19 O65 1(4) . . . . ?
W18 O72 W19 O59 -7.6(12) . . . . ?
W20 O74 W19 O73 -163(5) . . . . ?
W20 O74 W19 O64 -25(8) . . . . ?
W20 O74 W19 O72 87(5) . . . . ?
W20 O74 W19 O65 -71(5) . . . . ?
W20 O74 W19 O59 12(5) . . . . ?
W20 O74 W19 W18 57(5) . . . . ?
W14 O65 W19 O73 -152(2) . . . . ?
W14 O65 W19 O64 -53(3) . . . . ?
W14 O65 W19 O72 16(5) . . . . ?
W14 O65 W19 O74 109(3) . . . . ?
W14 O65 W19 O59 25(2) . . . . ?
W14 O65 W19 W18 17(3) . . . . ?
Si2 O59 W19 O73 87(12) . . . . ?
W18 O59 W19 O73 -135(12) . . . . ?
W13 O59 W19 O73 -44(12) . . . . ?
Si2 O59 W19 O64 130(2) . . . . ?
W18 O59 W19 O64 -91.7(16) . . . . ?
W13 O59 W19 O64 -0.7(15) . . . . ?
Si2 O59 W19 O72 -133(2) . . . . ?
W18 O59 W19 O72 5.1(8) . . . . ?
W13 O59 W19 O72 96.1(10) . . . . ?
Si2 O59 W19 O74 -35(2) . . . . ?
W18 O59 W19 O74 102.8(11) . . . . ?
W13 O59 W19 O74 -166.2(11) . . . . ?
Si2 O59 W19 O65 50(2) . . . . ?
W18 O59 W19 O65 -171.6(11) . . . . ?
W13 O59 W19 O65 -80.7(11) . . . . ?
Si2 O59 W19 W18 -138(2) . . . . ?
W13 O59 W19 W18 91.0(10) . . . . ?
O72 W18 W19 O73 -16.0(18) . . . . ?
O70 W18 W19 O73 -109.9(17) . . . . ?
O71 W18 W19 O73 1(3) . . . . ?
O63 W18 W19 O73 93.2(16) . . . . ?
O62 W18 W19 O73 161.4(16) . . . . ?
O59 W18 W19 O73 174.1(16) . . . . ?
O72 W18 W19 O64 -111(2) . . . . ?
O70 W18 W19 O64 155.1(19) . . . . ?
O71 W18 W19 O64 -94(3) . . . . ?
O63 W18 W19 O64 -1.8(17) . . . . ?
O62 W18 W19 O64 66.4(17) . . . . ?
O59 W18 W19 O64 79.1(17) . . . . ?
O70 W18 W19 O72 -93.9(18) . . . . ?
```

```
O71 W18 W19 O72 17(3) . . . . ?
O63 W18 W19 O72 109.2(16) . . . . ?
O62 W18 W19 O72 177.4(16) . . . . ?
O59 W18 W19 O72 -169.9(16) . . . . ?
O72 W18 W19 O74 93.3(15) . . . . ?
O70 W18 W19 O74 -0.6(14) . . . . ?
O71 W18 W19 O74 110(2) . . . . ?
O63 W18 W19 O74 -157.5(12) . . . . ?
O62 W18 W19 O74 -89.3(12) . . . . ?
O59 W18 W19 O74 -76.6(12) . . . . ?
O72 W18 W19 O65 -179.4(18) . . . . ?
O70 W18 W19 O65 86.7(16) . . . . ?
O71 W18 W19 O65 -163(2) . . . . ?
O63 W18 W19 O65 -70.2(14) . . . . ?
O62 W18 W19 O65 -2.0(14) . . . . ?
O59 W18 W19 O65 10.7(14) . . . . ?
O72 W18 W19 O59 169.9(16) . . . . ?
O70 W18 W19 O59 76.0(14) . . . . ?
O71 W18 W19 O59 -173(2) . . . . ?
O63 W18 W19 O59 -80.9(13) . . . . ?
O62 W18 W19 O59 -12.7(13) . . . . ?
W19 O74 W20 O75 168(5) . . . . ?
W19 O74 W20 O66 70(5) . . . . ?
W19 O74 W20 O67 3(8) . . . . ?
W19 O74 W20 O76 -89(5) . . . . ?
W19 O74 W20 O60 -11(5) . . . . ?
W15 O66 W20 O75 164(3) . . . . ?
W15 O66 W20 O74 -106(3) . . . . ?
W15 O66 W20 O67 54(3) . . . . ?
W15 O66 W20 O76 -12(6) . . . . ?
W15 O66 W20 O60 -21(3) . . . . ?
W16 O67 W20 O75 -166.7(19) . . . . ?
W16 O67 W20 O74 -2(5) . . . . ?
W16 O67 W20 O66 -70.4(18) . . . . ?
W16 O67 W20 O76 90(2) . . . . ?
W16 O67 W20 O60 11.7(17) . . . . ?
W17 O76 W20 O75 -175(2) . . . . ?
W17 O76 W20 O74 94(2) . . . . ?
W17 O76 W20 O66 1(6) . . . . ?
W17 O76 W20 O67 -65(2) . . . . ?
W17 O76 W20 O60 10(2) . . . . ?
Si2 O60 W20 O75 24(18) . . . . ?
Si2 O60 W20 O74 35(2) . . . . ?
Si2 O60 W20 O66 -54(2) . . . . ?
Si2 O60 W20 O67 -140(3) . . . . ?
Si2 O60 W20 O76 129(3) . . . . ?

loop_
  _platon_squeeze_void_nr
  _platon_squeeze_void_average_x
  _platon_squeeze_void_average_y
  _platon_squeeze_void_average_z
  _platon_squeeze_void_volume
  _platon_squeeze_void_count_electrons
         1     0.612     0.214     0.531     928.5      13.2
_platon_squeeze_details
;
;


_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.449
_diffrn_reflns_theta_full              33.01
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.449
_refine_diff_density_max    2.057
_refine_diff_density_min   -2.395
_refine_diff_density_rms    0.305
```